

Libros de **Cátedra**

# Elementos de física moderna

Osvaldo Civitarese

FACULTAD DE  
CIENCIAS EXACTAS

**e**  
exactas

 **Edulp**  
Editorial  
de la Universidad  
de La Plata



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA

# ELEMENTOS DE FÍSICA MODERNA

Oswaldo Civitarese

Facultad de Ciencias Exactas

Universidad Nacional de La Plata



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



A Daniel Bes, con afecto y admiración

# Agradecimientos

A los Drs Manuel Gadella (Universidad de Valladolid), Peter Hess y Jorge Hirsch (UNAM, México), Roberto Liotta (Universidad de Estocolmo, Suecia), Marta Reboiro (UNLP), Mercedes Mosquera (UNLP) y Marcos Saraceno (CNEA, Argentina), y a la Lic. Laura Epelbaum, quienes han leído valientemente y sin protestar, diferentes versiones del texto y han contribuído a su mejoramiento.  
Dejo constancia de mi agradecimiento a estos sacrificados y muy calificados lectores.

Con mis maestros he aprendido mucho;

con mis alumnos todavía más.

**Proverbio hindú**

*Prólogo*

El contenido de este libro está diagramado de manera de satisfacer los requerimientos de un curso regular de un cuatrimestre de duración (aproximadamente 16 semanas, a razón de 10 horas semanales de clases teórico-prácticas) y presupone que el estudiante puede tomar dicho curso en el cuarto semestre de la carrera. El manejo de algunos conceptos utilizados en este libro, relacionados con representaciones geométricas y operaciones con matrices, se verá facilitado, naturalmente, si el estudiante ha tomado cursos de geometría y álgebra lineal.

Los capítulos están organizados siguiendo un esquema centrado en la presentación de conceptos básicos y atendiendo, fundamentalmente, a posibilitar la realización de cálculos simples y concretos dentro de cada uno de los formalismos presentados.

Los primeros capítulos están dedicados a la presentación de la Teoría de la Relatividad Especial, a partir de la discusión del significado newtoniano de la relatividad y de la crítica del papel del observador. La discusión sobre el significado de las transformaciones de Lorentz se presenta en el Capítulo 1, a partir de representaciones geométricas y por comparación directa con las transformaciones de Galileo. La formalización de las operaciones de transformación entre observadores inerciales, a partir de los postulados de Einstein, se describe en el Capítulo 2 utilizando la representación matricial. Las consecuencias físicas relacionadas con los conceptos de masa y energía relativistas se discuten en el Capítulo 3. El Capítulo 4 está dedicado a las nociones elementales del cálculo tensorial y a su aplicación en la Teoría de la Relatividad Especial.

La transición entre los conceptos propios de la Mecánica Clásica y los correspondientes a la Mecánica Cuántica se discute con ejemplos concretos en el Capítulo 5, donde se presentan las explicaciones del efecto fotoeléctrico, el efecto Compton y las leyes de la radiación. Este último tema incluye, además, la discusión de las leyes de distribución clásicas: la distribución de velocidades de Maxwell y la distribución de Maxwell-Boltzmann. El Capítulo 6 está dedicado a la presentación del modelo atómico de Bohr.

En el Capítulo 7 se discuten los postulados básicos de la Mecánica Cuántica, de manera formal. La lectura de este capítulo se verá facilitada si el estudiante está familiarizado con técnicas de álgebra lineal, aunque si no las posee las definiciones presentadas permiten su estudio sin mayores dificultades. Aquí se adoptó un punto de vista muy pragmático, ya que no se trata de discutir la fundamentación de la Mecánica Cuántica, sino de introducir sus postulados y aplicarlos a cálculos concretos. El Capítulo 8 está dedicado al estudio del oscilador armónico cuántico unidimensional y el Capítulo 9 al estudio de los problemas sencillos relacionados con barreras y pozos de potencial unidimensionales. El Capítulo 10 está dedicado a la discusión del problema del potencial central y como aplicaciones se presentan las soluciones correspondientes al potencial coulombiano y al oscilador armónico, ambos en tres dimensiones espaciales.

Finalmente, los aspectos relacionados con las estadísticas cuánticas se presentan en el Capítulo 11.

Cada uno de los capítulos de este libro contiene, al final, la enumeración de los conceptos básicos presentados, a manera de guía para el lector y ejercicios de aplicación.

El Capítulo 12 está dedicado a la revisión de la literatura disponible y tiene como objeto orientar al estudiante en la elección de textos relacionados con el material que se presenta en el libro. Los textos correspondientes a cada capítulo (las citas completas se

consignan en la sección Bibliografía) son los siguientes: para los primeros cuatro capítulos son el texto de J. D'Iverno y el texto de W. Pauli; para los Capítulos 5 y 6 es el libro de R. P Feynman, R. D. Leighton and M. Sands, para los Capítulos 7 al 10, los textos de consulta son el libro de F. Mandl y el libro de D. R. Bes. El texto de consulta, para el Capítulo 11 es el libro de F. Mandl.

# Índice

<b>1</b>	<b>POSTULADOS RELATIVISTAS</b>	<b>1</b>
1.1	Introducción . . . . .	1
1.2	Transformaciones de Galileo . . . . .	1
1.3	El Principio de la Relatividad Especial . . . . .	5
1.4	Postulados de Einstein . . . . .	6
1.5	Velocidades relativas . . . . .	6
1.6	El concepto de simultaneidad . . . . .	9
1.7	El cono de luz . . . . .	10
1.8	La paradoja del reloj . . . . .	11
1.9	Las transformaciones de Lorentz . . . . .	11
1.10	Concepto de representación espacio-tiempo . . . . .	13
1.11	Resumen del capítulo . . . . .	16
1.12	Problemas . . . . .	17
<b>2</b>	<b>TRANSFORMACIONES DE LORENTZ</b>	<b>19</b>
2.1	Introducción . . . . .	19
2.2	Derivación de las transformaciones de Lorentz . . . . .	19
2.3	Propiedades de las transformaciones de Lorentz . . . . .	22
2.4	Contracción espacial . . . . .	23
2.5	Dilatación temporal . . . . .	25
2.6	Tiempo propio . . . . .	25
2.7	Transformación de velocidades . . . . .	26
2.8	El concepto de aceleración en la Relatividad Especial . . . . .	27
2.9	Aceleración uniforme . . . . .	28

2.10	Resumen del capítulo . . . . .	29
2.11	Problemas . . . . .	30
<b>3</b>	<b>MECÁNICA RELATIVISTA</b>	<b>31</b>
3.1	Introducción . . . . .	31
3.2	Elementos de Mecánica Relativista . . . . .	31
3.3	Masa Relativista . . . . .	32
3.4	Energía Relativista . . . . .	33
3.5	El efecto Doppler . . . . .	36
3.6	Fotones . . . . .	37
3.7	Resumen del capítulo . . . . .	39
3.8	Problemas . . . . .	39
<b>4</b>	<b>FORMULACIÓN TENSORIAL</b>	<b>41</b>
4.1	Introducción . . . . .	41
4.2	Vectores . . . . .	41
4.3	Operaciones entre vectores . . . . .	41
4.4	Trayectorias . . . . .	43
4.5	Transformaciones entre vectores . . . . .	43
4.6	Formulación tensorial . . . . .	47
4.7	Leyes de conservación energía-impulso . . . . .	50
4.8	Resumen del capítulo . . . . .	51
4.9	Problemas . . . . .	51
<b>5</b>	<b>FENÓMENOS CUÁNTICOS</b>	<b>53</b>
5.1	Introducción . . . . .	53
5.2	Efecto fotoeléctrico . . . . .	54
5.3	Efecto Compton . . . . .	55
5.4	Termodinámica de la radiación . . . . .	58
5.5	Elementos de la teoría de distribuciones . . . . .	58
5.6	Distribuciones clásicas . . . . .	60
5.6.1	Distribución de Maxwell . . . . .	60
5.6.2	Distribución de Maxwell-Boltzmann . . . . .	62

5.7	Distribución de Planck . . . . .	65
5.7.1	Ondas electromagnéticas en una cavidad . . . . .	66
5.7.2	Sumas estadísticas . . . . .	68
5.8	Resumen del capítulo . . . . .	69
5.9	Problemas . . . . .	69
<b>6</b>	<b>MODELO ATÓMICO DE BOHR</b>	<b>71</b>
6.1	Introducción . . . . .	71
6.2	Postulados de Bohr . . . . .	72
6.3	Series espectrales . . . . .	75
6.4	Resumen del capítulo. . . . .	79
6.5	Problemas . . . . .	79
<b>7</b>	<b>POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA</b>	<b>81</b>
7.1	Introducción . . . . .	81
7.2	Estado de un sistema: representaciones . . . . .	84
7.3	Operadores y observables: representaciones . . . . .	85
7.4	Valores esperados y observables . . . . .	86
7.5	Operadores lineales . . . . .	87
7.6	Espectro de operadores, ortonormalidad . . . . .	88
7.7	Ecuación de Schrödinger . . . . .	90
7.8	Estados estacionarios . . . . .	91
7.9	Cuadro comparativo de conceptos clásicos y cuánticos . . . . .	92
7.10	Oscilaciones del valor esperado . . . . .	92
7.11	Principio de incerteza . . . . .	93
7.12	Resumen del capítulo. . . . .	94
7.13	Problemas . . . . .	95
<b>8</b>	<b>EL OSCILADOR ARMÓNICO</b>	<b>97</b>
8.1	Introducción . . . . .	97
8.2	Hamiltoniano . . . . .	97
8.3	Autoestados del oscilador . . . . .	98
8.4	Funciones de onda normalizadas . . . . .	102

8.5	Desviación del valor medio . . . . .	106
8.6	Principio de correspondencia . . . . .	108
8.7	Resumen del capítulo . . . . .	108
8.8	Problemas . . . . .	108
<b>9</b>	<b>POZOS Y BARRERAS DE POTENCIAL</b>	<b>109</b>
9.1	Introducción . . . . .	109
9.2	Pozo cuadrado en una dimensión. . . . .	109
9.2.1	Soluciones de energía negativa . . . . .	110
9.2.2	Soluciones de energía positiva . . . . .	113
9.3	Pozo infinito. . . . .	114
9.4	Densidades y corrientes de probabilidad . . . . .	114
9.5	Barreras de Potencial . . . . .	115
9.5.1	Solución para el caso $E < V_0$ . . . . .	116
9.5.2	Solución para el caso $E > V_0$ . . . . .	118
9.6	Resumen del capítulo. . . . .	118
9.7	Problemas . . . . .	119
<b>10</b>	<b>CAMPO CENTRAL</b>	<b>121</b>
10.1	Cuantificación del momento angular . . . . .	121
10.2	Autofunciones del momento angular . . . . .	122
10.3	Transformación de variables . . . . .	124
10.4	Ecuación de Schrödinger: potencial coulombiano . . . . .	125
10.5	Separación de variables . . . . .	125
10.6	Soluciones de la ecuación radial . . . . .	126
10.7	Autovalores y autofunciones . . . . .	127
10.8	Comparación con el modelo de Bohr . . . . .	130
10.9	El oscilador armónico . . . . .	131
10.10	Soluciones de la ecuación radial . . . . .	132
10.11	Autovalores y autofunciones . . . . .	132
10.12	Funciones de onda . . . . .	134
10.13	Resumen del capítulo . . . . .	137
10.14	Problemas . . . . .	137

<b>11 ESTADÍSTICAS CUÁNTICAS</b>	<b>139</b>
11.1 Introducción . . . . .	139
11.2 El spin . . . . .	139
11.3 Números de ocupación . . . . .	140
11.3.1 Probabilidades normalizadas . . . . .	140
11.3.2 Sumas estadísticas y números de ocupación . . . . .	141
11.3.3 Números de ocupación: Fermiones . . . . .	142
11.3.4 Números de ocupación: Bosones . . . . .	143
11.3.5 Números de ocupación: Fotones . . . . .	144
11.4 Estadísticas cuánticas y límites clásicos . . . . .	145
11.5 Resumen del capítulo . . . . .	146
11.6 Problemas . . . . .	146
<b>12 BIBLIOGRAFIA</b>	<b>147</b>
12.1 Libros de Texto . . . . .	147

# Capítulo 1

## POSTULADOS RELATIVISTAS

### 1.1 Introducción

El descubrimiento de la relación existente entre la geometría y la física, proceso iniciado por Galileo (1570-1612) y continuado por Newton (1642-1727) alcanzó pleno desarrollo con Maxwell (1831-1879) quien confirió estado de teoría a la unificación de los fenómenos eléctricos y magnéticos. Posteriormente, el estudio de las aplicaciones del electromagnetismo a la descripción de fenómenos dinámicos puso de manifiesto la existencia de inconsistencias entre la dinámica newtoniana y el electromagnetismo de Maxwell. El comienzo del siglo XX, marcó el inicio de una época de profundas transformaciones de la Física, ya que al puntualizarse las dificultades existentes en la descripción newtoniana de la electrodinámica de los cuerpos en movimiento se posibilitó el advenimiento de la dinámica relativista. Esta teoría, formulada por Einstein, modificó severamente la concepción newtoniana en lo relacionado al papel del observador en la descripción de fenómenos dinámicos y, entre otras cosas, abolió el concepto newtoniano de tiempo absoluto. Conceptualmente, la Teoría de la Relatividad Especial es una teoría clásica que generaliza la relación descubierta por Galileo entre la geometría y los fenómenos dinámicos. En este capítulo estudiaremos el significado de las transformaciones de Galileo en el contexto de la dinámica de Newton y analizaremos su generalización, de acuerdo a los postulados de la Teoría de la Relatividad Especial. Discutiremos, finalmente, el significado de las transformaciones de Lorentz (1853-1928) por comparación directa con las transformaciones de Galileo y como extensión de las mismas.

### 1.2 Transformaciones de Galileo

Comenzaremos definiendo el significado de un *evento* y su representación, en la mecánica newtoniana, mediante la utilización de *diagramas espacio-tiempo*. La noción intuitiva de *evento* corresponde a todo aquello que ocurre durante un intervalo de tiempo corto en una región limitada del espacio. Podemos idealizar este concepto llamando *evento* al *fenómeno físico* que ocurre en un *punto* del espacio,  $x$ , en un instante de tiempo,  $t$ . Si representamos cada evento,  $P$ , en función de la asignación de coordenadas  $(x,t)$ , escribiremos:

$$P \equiv P(x, t). \tag{1.2.1}$$

Como primer ejemplo supondremos el movimiento rectilíneo de un cuerpo, cuya velocidad es constante, como función del tiempo. En un diagrama  $(x,t)$  la *historia* o *línea de universo* del cuerpo es una línea recta, cuya pendiente es la inversa de la velocidad del cuerpo ya que

$$x = x_0 + vt, \quad (1.2.2)$$

y en consecuencia

$$t = \frac{(x - x_0)}{v} = \frac{x}{v} - t_0. \quad (1.2.3)$$

De esta manera podemos construir *diagramas espacio-tiempo*, como los que se muestran en la Figura 1.1. En esa figura las velocidades indicadas son velocidades relativas a A, que arbitrariamente corresponde al conjunto de puntos  $x(t)$  pertenecientes a la trayectoria con  $v = 0$ . Las trayectorias B y D representan velocidades positivas con respecto a A y la trayectoria C corresponde a una velocidad negativa respecto a A. En esta representación los observadores B y D se alejan de A mientras el observador C se dirige hacia A. La recta correspondiente a la velocidad  $v = c = 1$  representa la línea de universo de una señal luminosa. El sistema de unidades adoptado es el llamado *sistema relativista*, en este sistema las velocidades son adimensionales y los tiempos se miden en unidades de longitud. La definición de evento que hemos introducido implica el conocimiento de los valores de la posición y del tiempo  $(x,t)$  asignados al mismo. Llamaremos *observadores* a los individuos o sistemas de detección dotados de una regla y un reloj. Estos observadores confeccionan tablas o registros donde se consignan los valores de la posición,  $x$ , y del tiempo,  $t$ , correspondientes a la línea de universo de un dado conjunto de eventos. Como la especificación de la posición de un evento por parte de un observador requiere de la elección de un origen ( $x=0$ ) respecto al cual el valor de  $x$  asociado al evento está unívocamente definido, es necesario introducir, además del reloj y la regla, un sistema de coordenadas. El conjunto *regla-reloj-sistema de coordenadas* constituye un *sistema de referencia*. En la descripción *newtoniana* de un evento si dos o más observadores han sincronizado sus relojes en un dado instante, ellos siempre estarán de acuerdo en la lectura que hagan de los tiempos asociados al evento, independientemente de sus movimientos relativos. Este es el concepto de *tiempo absoluto* de la mecánica de Newton. Supongamos que un tren se desplaza a velocidad constante  $v$  y que un observador fija su sistema de referencia en el tren, tomando el origen del sistema de coordenadas en su asiento. Supongamos que otro observador está ubicado en tierra, en el andén de una estación. Si ambos observadores han sincronizado sus relojes en el instante de tiempo correspondiente a la partida del tren desde la estación, el observador cuyo sistema de coordenadas está fijo al tren describe su línea de universo como una recta paralela al eje temporal. Para el observador en tierra, el tren se mueve de acuerdo a la ecuación  $x(t) = x_0 + vt$  y la correspondiente línea de universo es una recta cuya pendiente es  $1/v$ . En el contexto newtoniano las lecturas de los valores del tiempo coincidirán para ambos observadores. Con respecto a su sistema de referencia el observador en el tren está en reposo, ya que suponemos que no se mueve de su asiento, y sus lecturas del tiempo indican valores que coinciden con los valores del tiempo que mide el observador en tierra para quien el tren, y por ende el observador fijo al tren, se ha desplazado una distancia  $x(t)$  en el tiempo  $t$ . Ahora bien, si debemos elegir una forma de describir el fenómeno, esto es el movimiento del tren, podemos preguntarnos cuál elegir. El concepto de *relatividad* se refiere a la forma en que diferentes observadores describen el mismo fenómeno.

La teoría de Newton postula la existencia de un sistema de referencia *preferido*, tal

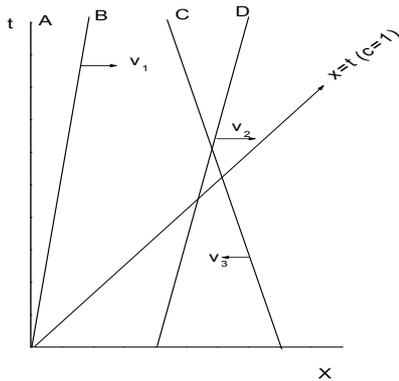


Figura 1.1: Diagramas espacio-tiempo, para diferentes historias o líneas de universo. Cada línea de universo corresponde a una dada velocidad. La recta  $x = t$  corresponde a la velocidad  $v = c = 1$ . En estas unidades, llamadas unidades relativistas, la recta con pendiente unidad representa la línea de universo de una señal luminosa

como lo establece la Primera Ley de Newton: *Todo cuerpo continúa en su estado de reposo o en movimiento rectilíneo uniforme a menos que su estado cambie por la acción de fuerzas aplicadas sobre él.* De acuerdo con esta ley existe un conjunto *privilegiado* de cuerpos, que son aquellos sobre los que no actúan fuerzas. Los sistemas de referencia de observadores fijos a estos cuerpos se denominan *sistemas inerciales*. De manera que si hemos encontrado un sistema inercial,  $S$ , entonces cualquier otro sistema inercial,  $S'$ , estará en reposo o se moverá con velocidad constante con respecto a  $S$ . Claramente, si esto no se cumple, la primera ley de Newton dejaría de ser válida. Las transformaciones que permiten el pasaje de un sistema inercial a otro sistema inercial son las *transformaciones de Galileo*. Consideremos, para fijar las ideas, que  $S$  y  $S'$  son dos sistemas inerciales, cuyos ejes coordenados son paralelos, y supongamos que  $S'$  se mueve respecto a  $S$  a lo largo del semieje positivo  $x$ , con velocidad constante  $V$  (ver Figura 1.2). Si dos observadores han sincronizado sus relojes en el instante en que los orígenes de ambos sistemas de coordenadas coincidieron, sus lecturas indicarán

$$x' = x - Vt, \quad y' = y \quad z' = z \quad t' = t \quad (1.2.4)$$

Estas son las *transformaciones de Galileo*. Como las leyes de Newton son válidas solamente en sistemas inerciales, podemos interpretar a las transformaciones de Galileo como las transformaciones frente a las cuales las leyes de Newton son *invariantes*.

La Segunda Ley de Newton establece que *El cambio del momento de un cuerpo con respecto al tiempo es igual a la fuerza aplicada sobre el cuerpo y está dirigido en la dirección del movimiento del cuerpo*. La demostración de la invariancia de esta ley al aplicar las transformaciones de Galileo es directa ya que, para una partícula de masa  $m$  constante, el cambio del momento con respecto al tiempo, se expresa en el sistema  $S$

$$F = \frac{dp}{dt} = m \frac{dv}{dt} \quad (1.2.5)$$

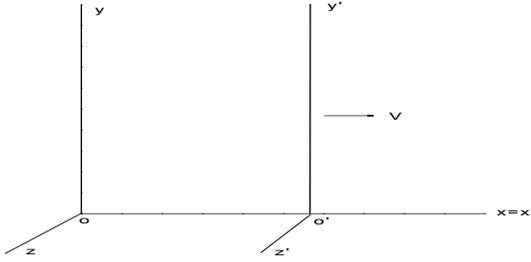


Figura 1.2: Representación de un par de sistemas inerciales. El sistema  $S'$  se mueve con velocidad  $V$ , a lo largo del eje  $x$  del sistema  $S$ .

En el sistema  $S'$  esta fuerza se escribe

$$F' = \frac{dp'}{dt} = m \frac{dv'}{dt} \quad (1.2.6)$$

y su valor coincide con el valor de la fuerza calculado en  $S$ , ya que

$$\frac{dv'}{dt} = \frac{dv}{dt} \quad (1.2.7)$$

Por lo tanto, no solamente el valor de la fuerza sino también la forma de la Segunda Ley de Newton se mantienen invariantes al aplicar las transformaciones de Galileo. El resultado anterior establece la *covariancia* de las leyes de Newton: *las leyes de Newton tienen la misma forma en diferentes sistemas de coordenadas al aplicar las transformaciones de Galileo*. Esta propiedad no se verifica en el caso de las ecuaciones de Maxwell, como veremos a continuación. Consideremos el caso de una carga,  $q$ , cuyo valor es el mismo para dos observadores  $S$  y  $S'$ ; llamemos  $V$  a la velocidad relativa entre ambos observadores y  $v$  y  $v'$  a los valores de la velocidad de la carga de prueba medidas en  $S$  y  $S'$ . Suponemos que la carga se mueve en una región del espacio donde no existe materia polarizable y en presencia de campos eléctricos y magnéticos estáticos. La fuerza neta sobre la carga medida en  $S$  es la fuerza de Lorentz:

$$F_S = q(E + v \times B) \quad (1.2.8)$$

Esta misma fuerza, según el observador en  $S'$  se escribe

$$F_{S'} = q(E' + v' \times B') \quad (1.2.9)$$

siendo  $(E, B)$  y  $(E', B')$  los campos medidos en  $S$  y  $S'$ , respectivamente. De acuerdo a los resultados obtenidos al aplicar las transformaciones de Galileo a las leyes de Newton, podemos pedir que los valores de  $F_S$  y  $F_{S'}$  coincidan y expresar las cantidades medidas en  $S$  en función de las cantidades medidas en  $S'$  ( $v' = v - V$ ), de donde resulta

$$F_{S'} = q(E' - V \times B' + v \times B') \quad (1.2.10)$$

En consecuencia, la igualdad entre las fuerzas requiere

$$B' = B \quad E' = E + V \times B \quad (1.2.11)$$

Claramente, la relación entre campos eléctricos implica que las fuentes en  $S$  y  $S'$  son diferentes, ya que:

$$\nabla \cdot E = 4\pi\rho \quad (1.2.12)$$

de donde

$$\rho_S = \rho_{S'} - \frac{1}{4\pi} \nabla' \cdot (V \times B) \quad (1.2.13)$$

La definición de la densidad de carga en cada sistema implica

$$\begin{aligned} \rho_S &= \frac{\Delta q}{\Delta vol_S} \\ \rho_{S'} &= \frac{\Delta q}{\Delta vol_{S'}} \end{aligned} \quad (1.2.14)$$

Ahora bien, la aplicación de las transformaciones de Galileo deja invariante el elemento de volumen ( $\Delta vol_S = \Delta vol_{S'}$ ) y ambos observadores miden la misma carga, por lo tanto debe cumplirse

$$\rho_S = \rho_{S'} \quad (1.2.15)$$

en contradicción con el resultado (1.2.13) obtenido al pedir la igualdad de los valores de las fuerzas. Notemos que, si pedimos la covariancia, respecto a las transformaciones de Galileo, de la fuerza sobre una carga y si esta tomara diferentes valores para diferentes observadores, la variación  $\nabla' \cdot (V \times B)$  podría utilizarse para definir la velocidad absoluta de un sistema. Estos resultados constituyen cuestionamientos severos al esquema newtoniano, ya que al tratar con fenómenos electromagnéticos: *o se abandona la noción de covariancia para las fuerzas electromagnéticas frente a las transformaciones de Galileo o bien se busca una generalización de las transformaciones de Galileo*. Esta fue la motivación del trabajo de Einstein y que llevó a la formulación de la Teoría de la Relatividad Especial, tal como discutiremos a continuación.

### 1.3 El Principio de la Relatividad Especial

El principio de relatividad, en la mecánica newtoniana, establece que

*Todos los observadores inerciales son equivalentes, en lo que respecta a experimentos dinámicos*

Esto quiere decir que si un observador inercial realiza un experimento dinámico y determina una dada ley física (i.e. si determina mediante sus mediciones la existencia de relaciones entre magnitudes físicas asociadas a dicho experimento) entonces cualquier otro observador inercial que realice la misma experiencia debe descubrir *la misma ley física*. En otras palabras, las leyes enunciadas por estos observadores inerciales deben ser invariantes frente a las transformaciones de Galileo. Podemos entonces afirmar que si la ley del ejemplo se escribe utilizando las coordenadas y el tiempo medidos por un observador en  $S$ , entonces debe escribirse de la misma manera en  $S'$ , reemplazando  $(x, y, z, t)$  por  $(x', y', z', t = t')$ . Este enunciado del principio de relatividad es equivalente a afirmar que mediante la realización de un experimento dinámico sobre un dado cuerpo no se puede decidir respecto al estado de movimiento, reposo o movimiento uniforme, de dicho cuerpo.

En la teoría de Newton no podemos determinar la posición *absoluta* de un evento en el espacio, ya que sólo podemos determinar tal posición con respecto a otro evento. De esta manera, posición y velocidad son conceptos *relativos*. El concepto de relatividad de la teoría de Newton puede criticarse, como lo hizo Einstein, diciendo que un experimento puramente dinámico no existe y que aún al nivel más elemental la realización de cualquier experimento dinámico implica *además* la realización de observaciones que están gobernadas por otras leyes físicas. Esto significa que al realizar un experimento dinámico debemos también observar, registrar y transmitir los valores de las variables dinámicas. El conjunto de acciones implícitas en el acto de la observación, para Einstein, no es parte de la dinámica.

## 1.4 Postulados de Einstein

De acuerdo a la interpretación de Einstein el principio de relatividad newtoniano debe re-formularse de la manera siguiente:

### Primer Postulado de Einstein:

*Todos los observadores inerciales son equivalentes*

Este postulado elimina la limitación impuesta por la naturaleza dinámica de un fenómeno físico. Supongamos, por ejemplo, que un observador mide la distancia a un objeto dado enviando una señal luminosa. Esta señal es reflejada por el objeto y recibida por el observador. Si adoptamos como método de medición de distancias la medición del tiempo transcurrido entre la emisión y la detección de la señal luminosa, la distancia desde el observador al objeto será proporcional a la mitad de la diferencia entre estos tiempos. Con este método, las distancias se expresan en unidades de tiempo y la constante de proporcionalidad es la velocidad de la luz en el vacío. Las observaciones astronómicas demuestran que la velocidad de la luz en el vacío es independiente del movimiento de las fuentes y es también independiente del color, intensidad, etc. Einstein adoptó la constancia del valor de la velocidad de la luz,  $c$ , en su segundo postulado:

### Segundo Postulado de Einstein:

*La velocidad de la luz es la misma en todos los sistemas inerciales*

El valor experimental de la velocidad de la luz en vacío es  $c = 2,99792458 \times 10^8 \text{ m/seg}$ , aproximadamente igual a  $3 \times 10^8 \text{ m/seg}$ . A continuación veremos algunas de las consecuencias de estos postulados.

## 1.5 Velocidades relativas

Consideremos las líneas de universo, o historias en el plano  $(x,t)$ , de dos observadores inerciales A y B. Suponemos, por simplicidad, que A está en reposo y que B está alejándose de A con velocidad constante. El diagrama de A será entonces una línea vertical paralela al eje  $t$  mientras que el de B formará un dado ángulo con el eje  $x$ . Por conveniencia fijemos el

valor  $c = 1$ , de manera que cualquier señal luminosa se puede representar como una recta a 45 grados (pendiente 1) respecto al eje  $x$ . En lo que resta del capítulo, las velocidades se indicarán en unidades relativistas. En consecuencia, para representar la línea de universo de la señal luminosa adoptaremos  $c=1$  y por lo tanto tendremos  $x=t$ .

Si A emite señales a intervalos de tiempo  $T$ , según su reloj, ellas serán recibidas por B a intervalos  $fT$ , donde  $f$  es un factor a determinar y que depende del movimiento de B relativo a A. Como ambos observadores son inerciales, este factor es independiente del tiempo. En otras palabras, estamos pidiendo que entre los valores de las coordenadas espaciales y tiempos de A y B exista una relación lineal. El principio de relatividad especial requiere que exista reciprocidad entre las relaciones de A y B, de manera que si B emite señales a intervalos  $T$  según su reloj, A las recibirá a intervalos  $fT$ , ya que desde el punto de vista de B es A quien se está alejando de B con velocidad constante. Consideremos la forma en que el observador A asigna coordenadas a un evento dado P. Si A envía una señal luminosa en el instante  $t = t_1$ , que es reflejada por P y recibida nuevamente por A en el instante  $t = t_2$ , A asignará las coordenadas

$$t = \frac{(t_1 + t_2)}{2} \quad , \quad x = \frac{(t_2 - t_1)}{2} \quad (1.5.1)$$

La demostración es muy simple y nos basaremos en el diagrama que se muestra en la Figura 1.3. En el triángulo  $(t_2tP)$  el lado  $(t_2t)$  es igual a  $x \tan \beta$  y en el triángulo  $(t_1tP)$  el lado  $(t_1t)$  es igual a  $x \tan \gamma$ . A partir de estas relaciones se obtiene

$$t_2 - t_1 = x(\tan \beta + \tan \gamma) \quad (1.5.2)$$

y como  $\beta = \gamma = \frac{\pi}{4}$ , y por lo tanto  $\tan \gamma = \tan \beta = 1$ , resulta

$$t_2 - t_1 = 2x \quad (1.5.3)$$

Análogamente, en el triángulo  $(t_1tP)$  se verifica

$$\frac{t - t_1}{x} = \tan \frac{\pi}{4} = 1 \quad (1.5.4)$$

y en consecuencia

$$t = t_1 + x \quad (1.5.5)$$

de donde resultan los valores indicados anteriormente para  $x$  y  $t$  en (1.5.1). Si los observadores A y B han sincronizado sus relojes cuando sus líneas de universo se cruzaron en el punto  $O$  y situamos a P sobre la línea de universo de B, la señal enviada por A, al cabo de un tiempo  $T$ , será recibida en P al cabo de un tiempo  $fT$  y recibida nuevamente en A al cabo de un tiempo  $f(fT) = f^2T$ . Todos estos valores están referidos a  $O$  (ver Figura 1.3).

Reemplazando estos valores en la definición de las coordenadas de P, obtenemos

$$t_1 = T \quad , \quad t_2 = f^2T$$

$$t = \frac{T(1 + f^2)}{2} \quad , \quad x = \frac{T(f^2 - 1)}{2} \quad (1.5.6)$$

Como  $T$  varía, estas son las coordenadas de los eventos que definen la línea de universo de B. Si  $V$  es la velocidad de B respecto a A, entonces

$$V = \frac{x}{t} = \frac{(f^2 - 1)}{(f^2 + 1)} \quad (1.5.7)$$

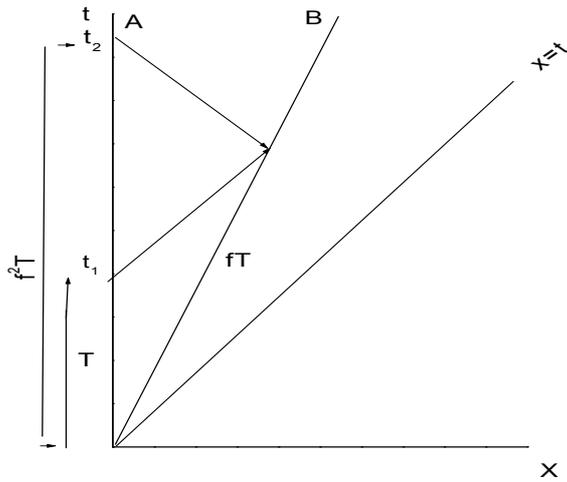


Figura 1.3: Transformación de lecturas del tiempo entre los observadores inerciales A y B. Ambos observadores han sincronizado sus relojes en O. El observador B se desplaza con velocidad constante  $V$  respecto al observador A. Por construcción (definición del método de la señal luminosa) el segmento que parte del eje temporal en B e intersecta al eje temporal en A en el punto  $t_1$  es paralelo a la recta  $x = t$  y el que lo intersecta en  $t_2$  es perpendicular a la recta  $x = t$ .

y en consecuencia

$$f = \left( \frac{1 + V}{1 - V} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.5.8)$$

Si B se está alejando de A entonces resulta  $f > 1$  y si B se acerca a A entonces  $f < 1$ . Naturalmente, si A está en reposo respecto a B y B está en reposo respecto a A (reposo relativo significa  $V = 0$ ) y han sincronizado sus relojes entonces sus relojes permanecerán sincronizados. Si ahora consideramos un tercer observador inercial, C, podemos utilizar el procedimiento anterior y escribir las relaciones

$$\begin{aligned} f(AB) &= \left( \frac{1 + V(AB)}{1 - V(AB)} \right)^{\frac{1}{2}} \\ f(BC) &= \left( \frac{1 + V(BC)}{1 - V(BC)} \right)^{\frac{1}{2}} \\ f(AC) &= \left( \frac{1 + V(AC)}{1 - V(AC)} \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (1.5.9)$$

y a partir de estas relaciones y de acuerdo al Primer Postulado, obtenemos

$$f(AC) = f(AB)f(BC) \quad (1.5.10)$$

y este resultado implica la regla de composición de velocidades

$$V(AC) = \frac{V(AB) + V(BC)}{1 + V(AB)V(BC)} \quad (1.5.11)$$

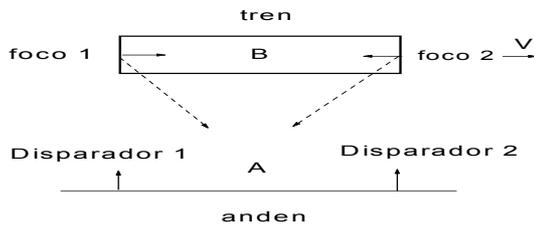


Figura 1.4: Vagón en movimiento respecto al andén. Las señales luminosas emitidas en los focos  $f_1$  y  $f_2$  son detectadas en tierra (disparadores 1 y 2) y en el centro del vagón

La demostración es sencilla y su realización se propone como ejercicio al final del capítulo. La Eq. (1.5.11) es una ley de composición de velocidades que difiere de la correspondiente a las transformaciones de Galileo

$$V(AC) = V(AB) + V(BC) \quad (1.5.12)$$

y está de acuerdo con el Segundo Postulado, ya que si suponemos  $V(BC) = 1$ , es decir: la velocidad relativa de C respecto a B es la velocidad de la luz, entonces resulta  $V(AC) = 1$ . A partir de esta nueva ley de composición de velocidades, podemos extraer las siguientes conclusiones:

- a) si sumamos dos velocidades menores que  $c$  el valor resultante es menor que  $c$
- b) si alguna de las velocidades es  $c$  el resultado de la suma es  $c$ .

En la teoría de la Relatividad Especial  $c$  tiene, por lo tanto, el significado de una velocidad límite.

## 1.6 El concepto de simultaneidad

La noción ordinaria de *simultaneidad* implica el tratamiento separado de las coordenadas espaciales y temporales de los eventos. Este no es el caso en la teoría de la Relatividad Especial, donde el papel que juega el concepto de *simultaneidad* es crítico.

Supongamos el siguiente experimento ideal: un observador (B) se sitúa en la mitad de un vagón de tren, el vagón tiene en cada extremo un dispositivo emisor de señales de luz que apuntan hacia el observador (fuentes de luz 1 y 2) y que se activan cuando el vagón pasa por dos puntos fijos en tierra (disparadores 1 y 2) separados entre sí por una distancia igual a la longitud del vagón; entre esos puntos fijos (disparadores) se sitúa otro observador (A) (ver Figura 1.4).

El vagón se mueve a velocidad  $V$  respecto a tierra y al pasar por los puntos fijos, de modo que cada extremo del vagón en movimiento coincida con un punto fijo (disparador) en tierra, se activan los emisores de luz. Para el observador A los destellos se producen

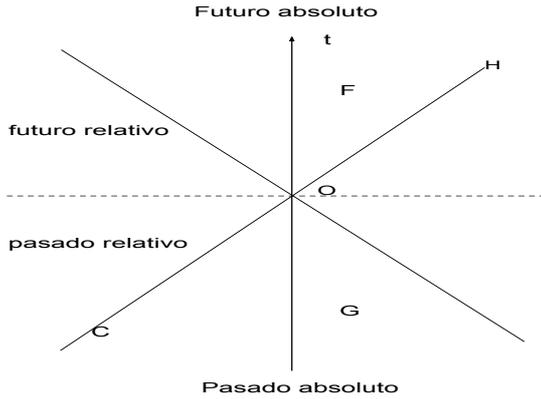


Figura 1.5: Cono de luz correspondiente al evento  $O$ . El evento  $O$  está precedido por el evento  $G$  y antecede al evento  $F$ . El evento  $C$ , sobre la línea de universo con  $v = c$  (señal luminosa), precede al evento  $O$ . Las zonas sombreadas representan el pasado y el futuro absolutos del evento  $O$ . Las zonas exteriores al cono de luz asociado a  $O$  representan el pasado relativo y el futuro relativo de  $O$ .

en forma simultánea pero el observador  $B$ , que se mueve hacia la luz disparada desde el extremo del vagón situado a su izquierda y que se aleja de la luz emitida por el dispositivo situado a su derecha (foco 1), verá la luz de la fuente 2 antes de ver la luz proveniente de la fuente 1. En consecuencia,  $B$  afirmará que las emisiones de luz han sido sucesivas y no simultáneas. Los eventos que  $A$  considera simultáneos son considerados por  $B$  como sucesivos. Esto nos demuestra el carácter relativo del concepto de simultaneidad. Podemos entonces hablar de la *relatividad de la simultaneidad*.

## 1.7 El cono de luz

Si consideramos un evento  $O$ , en la línea de universo de un dado observador, podemos distinguir cuatro regiones en el plano  $(x,t)$  determinadas por las dos rectas a  $\frac{\pi}{4}$  y a  $\frac{3\pi}{4}$ , respectivamente, respecto al semieje  $x$  positivo, y que se intersectan en  $O$  (ver Figura 1.5):

- a) el pasado absoluto de  $O$ : es la región limitada por las rectas  $x = \pm ct$ , en el semiplano inferior
- b) el futuro absoluto de  $O$ : es la región del semiplano superior limitada por las rectas  $x = \pm ct$
- c) el pasado relativo de  $O$ : son las regiones del semiplano inferior limitadas por el eje  $x$  y por las rectas  $x = \pm ct$
- d) el futuro relativo de  $O$ : son las regiones del semiplano superior limitadas por el eje  $x$  y por las rectas  $x = \pm ct$

Si ubicamos un evento  $H$  sobre una de las ramas positivas (semiplano superior)  $t = \pm \frac{1}{c}x$ , este evento ocurrirá después de  $O$  y es una manifestación de *causalidad*: el evento  $O$  causa el evento  $H$ . Si tomamos un evento  $F$  en la región entre las ramas positivas,

este evento ocurrirá después de  $O$ . Todos los observadores inerciales estarán de acuerdo en afirmar estas relaciones. Algo similar ocurrirá con los eventos tipo  $C$  ubicados sobre una de las ramas negativas y tipo  $G$ , ubicados en el semiplano inferior en el interior del cono de luz asociado a  $O$ , que serán descriptos por todos los observadores inerciales como antecesores de  $O$ .

Los eventos que se ubiquen fuera del *cono de luz* asociado a  $O$ , es decir los sectores del pasado relativo o del futuro relativo, no serán descriptos de la misma manera por todos los observadores inerciales. Notemos también que la línea de universo de cualquier observador inercial que pase por  $O$  debe estar en la región limitada por el *cono de luz*.

## 1.8 La paradoja del reloj

El significado del *tiempo*, en la Relatividad Especial, difiere al correspondiente a la teoría newtoniana. Para ilustrar esta afirmación discutiremos la llamada *paradoja del reloj*. Consideremos tres observadores inerciales, A, B y C, que se mueven con velocidades relativas  $V(AB) = -V(AC)$ . Supongamos (ver Figura 1.6) que A y B han sincronizado sus relojes al encontrarse en  $O(AB) \equiv O$  y que el reloj de C está sincronizado con el reloj de B en  $O(BC)$ . Supongamos, además, que B y C se encuentran al cabo de un tiempo  $T$  según B y que ambos emiten una señal luminosa a A. Entonces, de acuerdo a nuestros cálculos previos, A recibe esa señal en R luego de un tiempo  $f(AB)T$  medido desde el encuentro con B, donde  $f(AB) > 1$  ya que B se aleja de A. La señal enviada por C llegará a A después de un tiempo  $T/f(AB)$ , ya que las velocidades relativas tienen distinto signo y por consiguiente  $f(AC) \rightarrow 1/f(AB)$ . Este resultado se suele presentar como una paradoja. En realidad no lo es, ya que el tiempo relativista depende del camino recorrido por la señal. En este caso las mediciones fueron efectuadas por dos pares de observadores inerciales  $(AB)$  y  $(AC)$  cuyos movimientos relativos son *distintos*, ya que B se aleja de A y C se acerca a A, y no por un único par de observadores.

## 1.9 Las transformaciones de Lorentz

A continuación presentaremos una serie de transformaciones, conocidas como transformaciones de Lorentz especiales, que nos permitirán establecer relaciones entre las coordenadas y tiempos asignados a un dado evento por observadores inerciales. La forma general de estas transformaciones será discutida en el capítulo siguiente. Consideremos que a un evento  $P$  se le asignan coordenadas  $(x, t)$  en un sistema inercial A y  $(x', t')$  en un sistema inercial B. El observador A debe enviar luz en el instante  $t - x$  para iluminar a P y recibirá luz en el instante  $t + x$ . Suponemos que la línea de universo de A está dada por  $x = 0$  y que el origen para  $t$  en A es arbitrario (ver Figura 1.7). Si utilizamos las definiciones basadas en el uso de factores de transformación entre observadores inerciales, podemos escribir, tomando unidades relativistas:

$$\begin{aligned} t' - x' &= f(t - x) \\ t + x &= f(t' + x') \end{aligned}$$

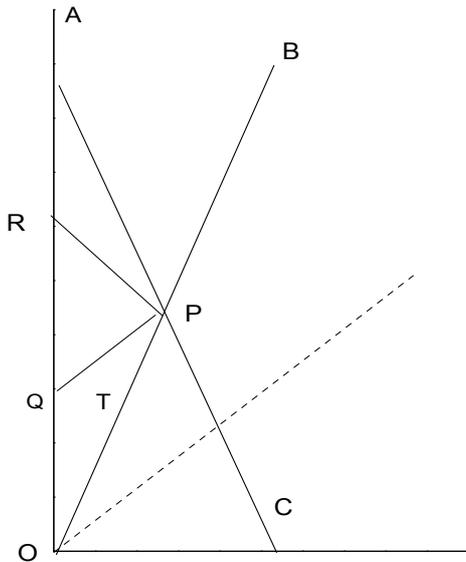


Figura 1.6: Interpretación gráfica de la llamada paradoja del reloj. El observador B se aleja del observador A con velocidad  $V_{AB} = V$ ; el observador C se aproxima al observador A con velocidad  $V_{AC} = -V$ . Las líneas de universo de los observadores B y C se intersectan en el punto P (punto de sincronismo de ambos sistemas). Ambos sistemas emiten señales hacia el sistema A. La señal que parte de C alcanza a A en el punto Q, correspondiente al valor  $T_{Q-O_{AB}} = f_{AC}T = (1/f_{AB})T$ ; la señal que parte de B alcanza a A en el punto R, al que se le asigna el valor  $T_{R-O_{AB}} = f_{AB}T$ , ya que  $f_{AC} = 1/f_{AB}$  y  $f_{AB} > 1$ . Ya que B se aleja de A, resulta  $T_{QO_{AB}} < T < T_{RO_{AB}}$

de donde resulta

$$\begin{aligned} t' &= \frac{1}{2} \left[ \left( f + \frac{1}{f} \right) t - \left( f - \frac{1}{f} \right) x \right] \\ x' &= \frac{1}{2} \left[ \left( f + \frac{1}{f} \right) x - \left( f - \frac{1}{f} \right) t \right] \end{aligned} \quad (1.9.1)$$

y como

$$\begin{aligned} f + \frac{1}{f} &= \frac{2}{\sqrt{1-v^2}} \\ f - \frac{1}{f} &= \frac{2v}{\sqrt{1-v^2}} \end{aligned} \quad (1.9.2)$$

podemos, finalmente, escribir

$$\begin{aligned} t' &= \frac{t - xv}{\sqrt{1-v^2}} \\ x' &= \frac{x - vt}{\sqrt{1-v^2}} \end{aligned}$$

En estas unidades el tiempo se mide en unidades de longitud, la velocidad es adimensional y se indica en fracciones de  $c$ . En unidades ordinarias ( $t \rightarrow tc$  y  $v \rightarrow \frac{v}{c}$ ) estas transformaciones toman la forma:

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

Las transformaciones (10.1.3) son un caso especial de las transformaciones de Lorentz y se interpretan como un arrastre del sistema de coordenadas  $S'$  en la dirección del semieje positivo  $x$  de  $S$ , con velocidad  $v$ . Notemos que si  $v \ll 1$  estas transformaciones toman la forma de las transformaciones de Galileo.

## 1.10 Concepto de representación espacio-tiempo

Podemos comparar las transformaciones especiales de Lorentz con las transformaciones de Galileo.

<i>Transformaciones de Galileo</i>	<i>Transformaciones de Lorentz</i>
$t' = t$	$t' = \frac{t - vx/c^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$
$x' = x - vt$	$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$
$y' = y$	$y' = y$
$z' = z$	$z' = z$

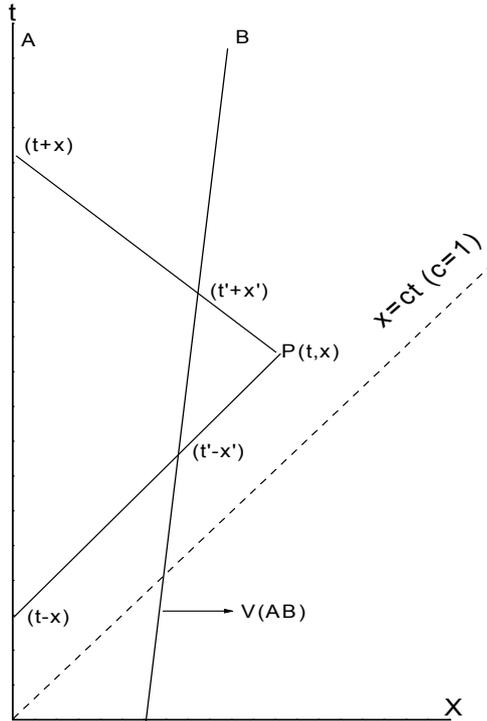


Figura 1.7: Transformación entre sistemas inerciales, de las coordenadas espacio-temporales asignadas a P

Vemos que en el caso de las transformaciones de Galileo la coordenada temporal es la misma para todos los observadores (tiempo absoluto de la teoría newtoniana). Para el caso de las transformaciones de Lorentz, las coordenadas espaciales y temporales están mezcladas. En la representación newtoniana, el tiempo está separado del espacio euclídeo y existe *simultaneidad absoluta*. Así, si consideramos dos eventos simultáneos, a los que asignamos coordenadas  $(t, x_1, y_1, z_1)$  y  $(t, x_2, y_2, z_2)$ , el cuadrado de la distancia euclídea,  $l$ , entre esos eventos se define como

$$l^2 = (x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2 \quad (1.10.1)$$

y es invariante frente a transformaciones de Galileo.

Si ahora tomamos en cuenta las transformaciones de Lorentz, las coordenadas espaciales y temporales se combinan de manera de definir el espacio continuo de 4 dimensiones (*espacio-tiempo*), donde el intervalo  $s$  entre dos eventos se define

$$s^2 = c^2(t_1 - t_2)^2 - (x_1 - x_2)^2 - (y_1 - y_2)^2 - (z_1 - z_2)^2 \quad (1.10.2)$$

Esta cantidad ( $s^2$ ) es invariante frente a transformaciones de Lorentz. Notemos que mientras  $l$  es siempre una cantidad definida positiva (o nula),  $s$  es real solo si  $s^2$  es no-negativo. En forma diferencial, suponiendo que las diferencias entre las coordenadas de ambos eventos son infinitesimales, tenemos

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 \quad (1.10.3)$$

El espacio de 4 dimensiones en el que la forma diferencial  $ds^2$  de la Ec. (1.10.3) es invariante frente a transformaciones de Lorentz especiales (10.1.3) es el *espacio de Minkowski*. En el Capítulo 2 definiremos la forma general de las transformaciones de Lorentz y estudiaremos algunas consecuencias importantes de la teoría.

Para concluir con esta introducción a las transformaciones de Lorentz nos referiremos a su interpretación como generalización lógica de las transformaciones de Galileo y basándonos en consideraciones de simetría.

En forma matricial, las transformaciones de Galileo se escriben de la manera siguiente

$$\begin{pmatrix} x' \\ t' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -v \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} \quad (1.10.4)$$

y resulta manifiesta la asimetría de la matriz de transformación. Si pensamos en una forma más simétrica, manteniendo la linealidad en la relación de  $(x, t)$  con  $(x', t')$ , podemos escribir

$$\begin{pmatrix} x' \\ t' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -v \\ -v\alpha & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} \quad (1.10.5)$$

donde el parámetro  $\alpha$  fue introducido para expresar el producto  $v\alpha x$  en las mismas unidades que  $t$ . A este argumento agregaremos como condición que la aplicación de dos transformaciones sucesivas, con velocidades  $v$  y  $-v$  deje invariante al conjunto de coordenadas iniciales. Expresaremos esta condición mediante el factor de normalización  $\beta$ , tal que

$$\begin{pmatrix} x' \\ t' \end{pmatrix} = \beta \begin{pmatrix} 1 & -v \\ -v\alpha & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} \quad (1.10.6)$$

El producto de transformaciones  $S \rightarrow S' \rightarrow S$  es la transformación unidad

$$\beta^2 \begin{pmatrix} 1 & -v \\ -v\alpha & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & v \\ v\alpha & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.10.7)$$

y esta igualdad implica

$$\beta^2 = \frac{1}{1 - v^2\alpha} \quad (1.10.8)$$

Por razones dimensionales  $\dim[\alpha] = (\text{velocidad})^{-2}$ . Finalmente, examinaremos la noción de intervalo espacio-temporal. Generalizando la definición de distancia entre dos puntos en espacio euclídeo, escribimos

$$s^2 = k^2 t^2 - x^2 \quad (1.10.9)$$

y pediremos que esta distancia sea invariante frente a la transformación  $S \rightarrow S'$ . Suponemos que el factor  $k$  es real y para determinar su valor escribiremos la igualdad

$$\begin{aligned}
k^2 t'^2 - x'^2 &= k^2 t^2 \beta^2 \left(1 - \frac{v^2}{k^2}\right) - x^2 \beta^2 (1 - k^2 \alpha^2 v^2) \\
&+ 2xtv \beta^2 (1 - \alpha k^2)
\end{aligned}
\tag{1.10.10}$$

La igualdad de ambos intervalos

$$k^2 t^2 - x^2 = k^2 t'^2 - x'^2 \tag{1.10.11}$$

se cumple si se anula el coeficiente en el término que contiene  $xtv$  y esto significa que los valores de  $k$  y  $\alpha$  están relacionados

$$k^2 = \frac{1}{\alpha} \tag{1.10.12}$$

Con este valor los coeficientes de los términos  $x^2$  y  $k^2 t^2$

$$\begin{aligned}
\beta^2 (1 - k^2 \alpha^2 v^2) &= \beta^2 (1 - \alpha v^2) = 1 \\
\beta^2 \left(1 - \frac{v^2}{k^2}\right) &= \beta^2 (1 - \alpha v^2) = 1
\end{aligned}
\tag{1.10.13}$$

se reducen a la unidad.

En definitiva la transformación generalizada requiere de un único parámetro ( $k$ ) que es independiente del sistema utilizado para describir el intervalo espacio-temporal. En la teoría de la Relatividad Especial, el valor del parámetro  $k$  es igual al valor de la velocidad de la luz en el vacío. Esta elección no es arbitraria, ya que respeta un hecho observacional: el valor de la velocidad de propagación de una señal luminosa en vacío es independiente del estado de movimiento de la fuente.

De esta manera, la generalización de las transformaciones de Galileo, en las condiciones de simetrización e invariancia descritas anteriormente, conduce a la forma

$$k = c \quad \alpha = \frac{1}{c^2} \quad \beta = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \tag{1.10.14}$$

de donde

$$\begin{pmatrix} x' \\ t' \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \begin{pmatrix} 1 & -v \\ -v/c^2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ t \end{pmatrix} \tag{1.10.15}$$

## 1.11 Resumen del capítulo

Se sugiere al estudiante que exprese, en sus propios términos, los conceptos, definiciones y principios que se enumeran a continuación, como forma de valorar los conocimientos adquiridos. La misma metodología se sugiere para los capítulos siguientes (y se omitirá en los correspondientes resúmenes esta mención)

- *Transformaciones de Galileo.*

- *Tiempo absoluto en la Mecánica Newtoniana.*
- *Líneas de Universo.*
- *Principio de Relatividad Especial.*
- *Postulados de Einstein.*
- *Velocidad relativa entre observadores inerciales.*
- *Simultaneidad.*
- *Cono de Luz.*
- *Paradoja del reloj.*
- *Transformaciones de Lorentz.*
- *Representación espacio-tiempo.*

## 1.12 Problemas

1. Dibujar el diagrama espacio-tiempo del evento que representa un cuerpo en reposo.
2. Demuestre que al cambiar  $V$  por  $-V$  (velocidad relativa entre dos observadores) resulta  $f \rightarrow \frac{1}{f}$ .
3. Demuestre la relación (1.5.11) (regla de composición de velocidades relativistas).
4. ¿En cuánto tiempo una señal luminosa recorre la distancia Tierra-Luna? y la distancia Tierra-Sol? Y la distancia Sol-estrella más próxima?. Exprese el valor de la distancia asociada a un año luz (distancia Tierra-Sol= $1.5 \cdot 10^2$  MKm, distancia Tierra-Próxima Centauri= $3.8 \cdot 10^7$  Mkm, donde  $1 \text{ MKm} = 10^6 \text{ Km}$ ).
5. Demostrar las relaciones entre  $(x, t)$  y  $(x', t')$ , ecuaciones (1.9.3), utilizando los valores indicados en la Figura 1.7.
6. Demostrar las relaciones existentes entre eventos pertenecientes a las diferentes regiones del cono de luz, dibujando las líneas de universo de dos o más observadores inerciales y utilizando los argumentos presentados al determinar las coordenadas de un evento, mediante los factores  $\gamma$ .
7. Demostrar que la distancia euclídea  $l$ , entre dos eventos, es invariante frente a las transformaciones de Galileo.
8. Demostrar que el intervalo espacio-temporal  $s^2 = c^2t^2 - x^2$  es invariante frente a las transformaciones de Lorentz.



## Capítulo 2

# TRANSFORMACIONES DE LORENTZ

### 2.1 Introducción

El objetivo de este Capítulo es estudiar las propiedades formales de las transformaciones de Lorentz y las consecuencias del uso de las mismas en relación a las nociones newtonianas de velocidad y aceleración. Para ello nos basaremos en los postulados relativistas.

### 2.2 Derivación de las transformaciones de Lorentz

Consideremos una partícula libre, es decir una partícula sobre la que no actúan fuerzas. Si  $u$  y  $u'$  son las velocidades de la partícula medidas por dos observadores  $S$  y  $S'$ , los vectores de posición de la partícula en esos sistemas de referencia se escriben

$$\begin{aligned}r &= r_0 + ut \\ r' &= r'_0 + u't'\end{aligned}\tag{2.2.1}$$

obviamente, tanto  $S$  como  $S'$  ven a la partícula moviéndose sobre una línea recta con velocidad constante.

Si asociamos las coordenadas  $(t, x, y, z)$  según  $S$  y  $(t', x', y', z')$  según  $S'$ , y teniendo en cuenta que en ambos sistemas las trayectorias se describen mediante rectas, podemos suponer que la transformación entre ambos conjuntos de coordenadas es una transformación lineal.

Ordenando los valores de las coordenadas asignadas como filas de una matriz de una columna, tenemos

$$\begin{bmatrix} t' \\ x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = L \begin{bmatrix} t \\ x \\ y \\ z \end{bmatrix}.\tag{2.2.2}$$

La matriz  $L$  es una matriz de cuatro filas y cuatro columnas, cuyos elementos sólo pueden depender de la velocidad relativa  $v$  entre  $S$  y  $S'$ . Si nos concentramos en la

estructura de  $L$  para un arrastre, donde los ejes espaciales de  $S$  y  $S'$  son paralelos y el origen de  $S'$  se mueve con velocidad  $v$  respecto al origen de  $S$  a lo largo del semieje  $x$  positivo de  $S$ , la matriz de transformación es de la forma:

$$L = \begin{bmatrix} L_{11} & L_{12} & 0 & 0 \\ L_{21} & L_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.2.3)$$

que es consistente con las igualdades

$$\begin{aligned} y' &= y \\ z' &= z \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

Al escribir estas transformaciones hemos supuesto que el espacio es isotrópico. Utilicemos ahora el Segundo Postulado y supongamos que  $S$  y  $S'$  han sincronizado sus relojes cuando sus orígenes  $O$  y  $O'$  coinciden. Si en ese instante ambos sistemas emiten una señal luminosa, los respectivos frentes de onda deben encontrarse al cabo de los tiempos  $t$  y  $t'$  sobre las superficies de las esferas determinadas por las ecuaciones

$$\begin{aligned} I(t, x, y, z) &\equiv c^2 t^2 - (x^2 + y^2 + z^2) = 0 && \text{(sistema } S) \\ I'(t', x', y', z') &\equiv c^2 t'^2 - (x'^2 + y'^2 + z'^2) = 0 && \text{(sistema } S') \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

La relación entre  $I$  e  $I'$  es necesariamente lineal, ya que ambas expresiones deben coincidir para el caso  $v = 0$  y deben representar el mismo evento si los roles de  $S$  y  $S'$  se intercambian. Si usamos las igualdades  $(y, z) = (y', z')$ , e igualamos las expresiones de  $I$  e  $I'$  resulta

$$c^2 t^2 - x^2 = c^2 t'^2 - x'^2 \quad (2.2.6)$$

Introduciremos ahora la coordenada temporal imaginaria. Este no es un paso esencial de la demostración, se trata de una elección conveniente,

$$T = ict \quad (2.2.7)$$

de modo que la igualdad de  $I$  e  $I'$  se puede escribir

$$T^2 + x^2 = T'^2 + x'^2 \quad (2.2.8)$$

En el espacio bi-dimensional  $(x, T)$  estos valores representan la distancia al origen de un dado punto  $P$ . Esta cantidad es invariante frente a rotaciones en dos dimensiones. Para determinar el valor de los elementos de matriz no nulos de  $L$ , y usando la invariancia de las distancias  $I(T, x) = I(T', x')$  frente a rotaciones, supondremos que los ejes correspondientes a  $S(T, x)$  y  $S'(T', x')$  están rotados en un ángulo  $\theta$  (ver Figura 2.1). En consecuencia

$$\begin{bmatrix} x' \\ T' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x \\ T \end{bmatrix} \quad (2.2.9)$$

El origen de  $S'(x' = 0)$ , visto por  $S$  se mueve a lo largo del eje  $x$  de  $S$  con velocidad  $v$  y por lo tanto para ese punto debe satisfacerse  $x = vt$ . Si reemplazamos este valor en la expresión para  $x'$  obtenemos

$$0 = \frac{vT}{ic} \cos \theta + T \sin \theta \quad (2.2.10)$$

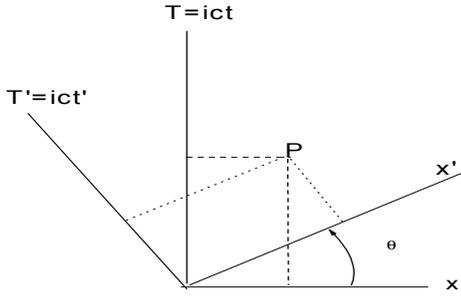


Figura 2.1: Asignación de coordenadas, para el evento P, en los sistemas S y S'.

de donde

$$\tan \theta = \frac{iv}{c} \quad (2.2.11)$$

y de esta manera hemos fijado el ángulo de la rotación. Notemos que se trata de un valor imaginario. Para determinar los valores de  $\cos \theta$  y  $\sin \theta$  escribimos

$$\begin{aligned} \cos \theta &= \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2 \theta}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

Como este factor aparecerá frecuentemente utilizaremos la abreviación

$$\beta \equiv \frac{1}{\sqrt{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}} \quad (2.2.13)$$

Con estos elementos ya estamos en condiciones de escribir la transformación en forma explícita, retornando a las variables reales  $(t, x, y, z)$ ,  $(t', x', y', z')$

$$\begin{aligned} x' &= \cos \theta (x + T \tan \theta) = \beta (x - vt) \\ t' &= \beta \left( t - \frac{xv}{c^2} \right) \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

Observemos que si escribimos estas ecuaciones en unidades relativistas ( $c = 1$ ) recuperamos la forma que hemos visto en el Capítulo anterior. En definitiva, para un arrastre según en eje  $x$ , la matriz de transformación es de la forma

$$L = \begin{bmatrix} \beta & -\beta \frac{v}{c^2} & 0 & 0 \\ -\beta v & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.2.15)$$

### 2.3 Propiedades de las transformaciones de Lorentz

A partir de los resultados que hemos discutido para las transformaciones de Lorentz, en el caso de transformaciones especiales o de arrastre entre sistemas coordinados, podemos enunciar las siguientes propiedades:

1. Utilizando la coordenada imaginaria  $T$ , tiempo imaginario  $T = ict$ , el arrastre del sistema  $S'$  en la dirección del eje  $x$  del sistema  $S$  y con velocidad  $v$  es equivalente a una rotación en el espacio  $(x, T)$
2. Si se considera al valor de  $v$  como muy pequeño respecto al valor de  $c$  ( $v \ll c, v/c \rightarrow 0$ ) entonces  $\beta \rightarrow 1$  y se re-obtienen las transformaciones de Galileo.

$$\begin{aligned}x' &= x - vt \\t' &= t\end{aligned}$$

3. Si se escriben las transformaciones desde el sistema  $S'$  al sistema  $S$  las expresiones resultantes son

$$\begin{aligned}x &= \beta(x' + vt') \\t &= \beta\left(t' + \frac{x'v}{c^2}\right)\end{aligned}\tag{2.3.1}$$

y equivalen a reemplazar  $v$  por  $-v$  en las transformaciones de  $S$  a  $S'$ , ya que el movimiento de  $S'$  visto desde  $S$  aleja al punto  $O'$  a lo largo del eje  $x$  con velocidad  $v$ , lo que implica que para  $S'$  el punto  $O$  se aleja con velocidad  $-v$  a lo largo del eje  $x'$ .

4. Las transformaciones dejan invariante el intervalo

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2\tag{2.3.2}$$

5. El producto de dos transformaciones de Lorentz especiales,  $L(v)$  y  $L(v')$ , es otra transformación de Lorentz especial  $L(v'')$  donde

$$v'' = \frac{v + v'}{1 + \frac{vv'}{c^2}}\tag{2.3.3}$$

Este resultado se demuestra fácilmente si efectuamos dos transformaciones  $S \rightarrow S' \rightarrow S''$ , con velocidades relativas  $v(S'S) = v$ ,  $v(S''S') = v'$  y las comparamos con una transformación  $S \rightarrow S''$  correspondiente a la velocidad relativa  $v(SS'') = v''$ . De esta manera

$$\begin{aligned}&\begin{bmatrix} \beta'' & -\beta''\frac{v''}{c^2} & 0 & 0 \\ -\beta''v'' & \beta'' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \\ &\begin{bmatrix} \beta & -\beta\frac{v}{c^2} & 0 & 0 \\ -\beta v & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \beta' & -\beta'\frac{v'}{c^2} & 0 & 0 \\ -\beta'v' & \beta' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\tag{2.3.4}\end{aligned}$$

el resultado de la multiplicación de estas matrices es la matriz

$$\begin{bmatrix} \beta\beta' \left(1 + \frac{vv'}{c^2}\right) & -\beta\beta' \left(\frac{v}{c^2} + \frac{v'}{c^2}\right) & 0 & 0 \\ -\beta\beta'(v + v') & \beta\beta' \left(1 + \frac{vv'}{c^2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.3.5)$$

e igualando a  $L(v'')$ , obtenemos

$$\begin{aligned} \beta'' &= \beta\beta' \left(1 + \frac{vv'}{c^2}\right) \\ \beta''v'' &= \beta\beta'(v + v') \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

Si dividimos ambas igualdades obtenemos

$$v'' = \frac{v + v'}{1 + \frac{vv'}{c^2}} \quad (2.3.7)$$

que es el resultado buscado. Análogamente

$$\beta'' = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v''^2}{c^2}}} \quad (2.3.8)$$

6. Como  $L(v)$  y  $L(v')$  representan rotaciones con ángulos  $\theta$  y  $\theta'$ , el producto es una rotación en un ángulo  $\theta'' = \theta + \theta'$ .

Las propiedades anteriores se pueden enunciar en forma muy sencilla diciendo que las matrices que representan las transformaciones de Lorentz especiales forman una estructura algebraica, llamada *grupo*, ya que:

- i)  $L(v = 0)$  es la matriz identidad;
- ii)  $L(-v)$  es la matriz inversa de  $L(v)$ , luego  $L(-v)L(v) = L(v = 0)$ ;
- iii) La matriz producto  $L(v)L(v') = L(v'')$  es también una matriz que representa una transformación especial de Lorentz, y
- iv) El producto de matrices es asociativo,  $(L(v)L(v'))L(v'') = L(v)(L(v')L(v''))$ .

Esta estructura se complementa definiendo el carácter unitario de la transformación, ya que el módulo del determinante de cualquier matriz perteneciente al grupo es igual a 1.

## 2.4 Contracción espacial

Consideremos una regla fija en el sistema  $S'$ , con extremos en  $x'_A$  y  $x'_B$ , como se muestra en la Figura 2.2. En el sistema  $S$  a los extremos de la regla se le asignan coordenadas  $x_A$  y  $x_B$ , que varían con el tiempo. La relación entre ambos conjuntos de coordenadas es la siguiente

$$\begin{aligned} x'_A &= \beta(x_A - vt_A) \\ x'_B &= \beta(x_B - vt_B) \end{aligned} \quad (2.4.1)$$

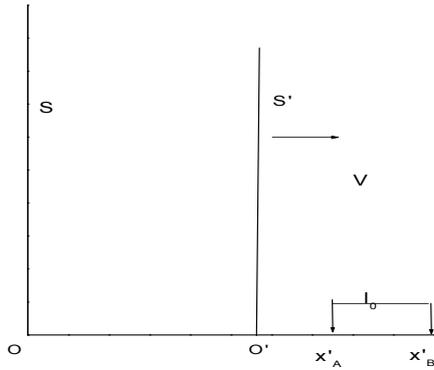


Figura 2.2: La regla se encuentra en reposo en el sistema en movimiento y su longitud medida en ese sistema ( $S'$ ) es  $l_0 = x'_B - x'_A$

Para obtener el valor de la longitud de la regla en  $S$  debemos tomar la diferencia de las coordenadas de los extremos en un mismo tiempo ( $t_A = t_B = t$ ),

$$l = x_B - x_A \quad (2.4.2)$$

análogamente, para  $S'$

$$l_0 = x'_B - x'_A \quad (2.4.3)$$

Como la regla está en reposo en el sistema  $S'$  el valor  $l_0$  se denomina *longitud en reposo*. La relación entre ambas longitudes es

$$l = \frac{l_0}{\beta} \quad (2.4.4)$$

Como

$$v < c \rightarrow \beta > 1 \quad (2.4.5)$$

vemos que  $l < l_0$ . Es decir, que la longitud de la regla medida en la dirección del movimiento se reduce en el factor  $\frac{1}{\beta}$ . Notemos que la longitud se reduce a cero a medida que  $v$  se aproxima a  $c$ . Este fenómeno se denomina *contracción espacial* y es un efecto real y no un artificio de la teoría. Notemos que no hay contracción espacial en direcciones transversales a la dirección de movimiento. El efecto de contracción espacial o *contracción de Lorentz* no debe confundirse con la llamada contracción de Fitzgerald. Para explicar el resultado negativo del experimento de Michelson y Morley, Fitzgerald propuso el acortamiento aparente de un cuerpo en movimiento respecto a un medio fijo, el eventual pero inexistente éter, soporte de las ondas electromagnéticas.

## 2.5 Dilatación temporal

Consideremos el caso representado en la Figura 2.3 donde se muestra la línea de universo de dos sistemas de referencia,  $S$  y  $S'$ . Si suponemos que un reloj fijo en  $S'$  (en  $x' = x'_A$ ) registra dos eventos sucesivos separados por el intervalo de tiempo  $T_0$ , estos eventos tendrán asociadas las coordenadas  $(x'_A, t'_1)$  y  $(x'_A, t'_1 + T_0)$ , por lo tanto, en  $S$

$$\begin{aligned} t_1 &= \beta \left( t'_1 + \frac{x'_A v}{c^2} \right) \\ t_2 &= \beta \left( t'_1 + T_0 + \frac{x'_A v}{c^2} \right) \end{aligned} \quad (2.5.1)$$

Si ahora calculamos la diferencia

$$T = t_2 - t_1 \quad (2.5.2)$$

esta resulta

$$T = \beta T_0 \quad (2.5.3)$$

como  $\beta > 1$  si  $v \neq 0$  el valor  $T$  será siempre mayor que el valor  $T_0$ . En otras palabras, los tiempos medidos por relojes en movimiento *transcurren* más lentamente que los tiempos medidos por relojes en reposo. Este fenómeno es conocido como *dilatación temporal* y es un auténtico fenómeno físico. Ha sido verificado originalmente mediante la detección de partículas, genéricamente conocidas como radiación cósmica, provenientes de fuentes ubicadas fuera de la Tierra y que poseen vidas medias mucho más cortas que sus tiempos de tránsito hacia la superficie de la Tierra. Estas partículas se mueven a velocidades que son fracciones apreciables de la velocidad de la luz. También ha sido verificado mediante la comparación de dos relojes atómicos. A uno de ellos se lo dejó fijo en tierra y al otro se lo hizo viajar en un satélite alrededor de la tierra. Las lecturas registradas por el reloj en órbita confirmaron los resultados previstos por el fenómeno de dilatación temporal.

## 2.6 Tiempo propio

Si consideramos el tiempo medido por un reloj en el sistema de referencia donde el reloj se encuentra en reposo, este tiempo será el más corto que mida ese reloj. Para un intervalo

$$ds'^2 = c^2 d\tau^2 \quad (2.6.1)$$

tendremos

$$d\tau^2 = dt^2 (1 - (dx/dt)^2/c^2) \quad (2.6.2)$$

de donde resulta, para el *tiempo propio*  $\tau$ , la expresión

$$d\tau = \frac{1}{\beta} dt \quad (2.6.3)$$

de manera que, para un intervalo  $(t_1, t_2)$  en el sistema  $S$ , el observador fijo al reloj medirá el valor

$$\tau = \int_{t_1}^{t_2} \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{1/2} dt \quad (2.6.4)$$

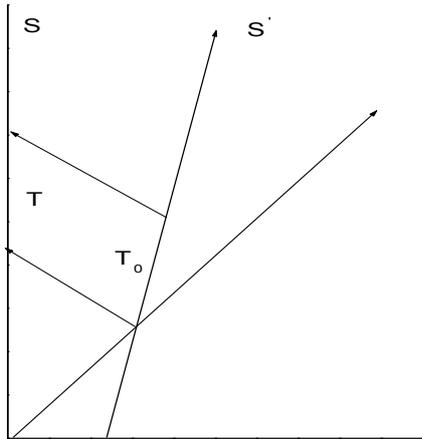


Figura 2.3: Dilatación temporal.

## 2.7 Transformación de velocidades

Debido a la combinación de coordenadas espaciales y temporales que caracteriza a las transformaciones de Lorentz, podemos preguntarnos cuál es la relación, si la hubiera, entre los conceptos newtonianos de velocidad y aceleración y los que resultan de la Teoría de la Relatividad Especial. Si asignamos a una partícula en movimiento las coordenadas espaciales  $(x, y, z)$  en  $S$  y las correspondientes  $(x', y', z')$  en  $S'$  las componentes cartesianas de la velocidad de la partícula, en ambos sistemas, se escriben

$$(u_1, u_2, u_3) = \left( \frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{dz}{dt} \right) \quad (2.7.1)$$

en  $S$  y

$$(u'_1, u'_2, u'_3) = \left( \frac{dx'}{dt'}, \frac{dy'}{dt'}, \frac{dz'}{dt'} \right) \quad (2.7.2)$$

en  $S'$ . Para calcular las derivadas tomaremos las transformaciones

$$\begin{aligned} x' &= \beta(x - vt) \\ t' &= \beta\left(t - \frac{xv}{c^2}\right) \\ y' &= y \\ z' &= z \end{aligned} \quad (2.7.3)$$

y las reemplazamos por su forma diferencial

$$\begin{aligned} dx' &= \beta(dx - vdt) \\ dt' &= \beta\left(dt - \frac{vdx}{c^2}\right) \\ dy' &= dy \\ dz' &= dz \end{aligned} \quad (2.7.4)$$

y por lo tanto

$$\begin{aligned}
 u'_1 \equiv \frac{dx'}{dt'} &= \frac{(dx - vdt)}{\left(dt - \frac{vdx}{c^2}\right)} \\
 &= \frac{(u_1 - v)}{\left(1 - \frac{u_1v}{c^2}\right)} \\
 u'_2 \equiv \frac{dy'}{dt'} &= \frac{dy}{\beta \left(dt - \frac{vdx}{c^2}\right)} \\
 &= \frac{u_2}{\beta \left(1 - \frac{u_1v}{c^2}\right)} \\
 u'_3 \equiv \frac{dz'}{dt'} &= \frac{dz}{\beta \left(dt - \frac{vdx}{c^2}\right)} \\
 &= \frac{u_3}{\beta \left(1 - \frac{u_1v}{c^2}\right)}
 \end{aligned} \tag{2.7.5}$$

Para obtener las transformaciones inversas  $S' \rightarrow S$  reemplazamos  $v \rightarrow -v$ . Podemos observar las siguientes características:

i) las expresiones se reducen al límite no-relativista (transformaciones de Galileo) si  $v \ll c$

ii) las componentes transversales de la velocidad de la partícula también están afectadas por las transformaciones, esto es una consecuencia de la diferencia en la definición de tiempos para  $S$  y  $S'$

iii) la mezcla entre componentes espaciales de la velocidad de la partícula es evidente de las expresiones. Esto no ocurre si se considera el tiempo absoluto de la mecánica newtoniana.

iv) la dependencia con el sistema de referencia, recordemos que  $u'$  es una función de  $u$  y de  $v$ , indica que la velocidad, en la teoría de la Relatividad Especial, es una magnitud relativa.

## 2.8 El concepto de aceleración en la Relatividad Especial

Así como hemos definido las componentes de  $u$ , a partir de la derivada temporal de las componentes espaciales de la posición, podemos calcular  $\frac{du}{dt}$ . Procediendo en forma completamente análoga al caso anterior obtenemos

$$\begin{aligned}
 \frac{du'_1}{dt'} &= \frac{1}{\beta^3 \left(1 - \frac{u_1v}{c^2}\right)^3} \frac{du_1}{dt} \\
 \frac{du'_2}{dt'} &= \frac{1}{\beta^2 \left(1 - \frac{u_1v}{c^2}\right)^2} \frac{du_2}{dt} + \frac{u_2v}{c^2 \beta^2 \left(1 - \frac{u_1v}{c^2}\right)^3} \frac{du_1}{dt} \\
 \frac{du'_3}{dt'} &= \frac{1}{\beta^2 \left(1 - \frac{u_1v}{c^2}\right)^2} \frac{du_3}{dt} + \frac{u_3v}{c^2 \beta^2 \left(1 - \frac{u_1v}{c^2}\right)^3} \frac{du_1}{dt}
 \end{aligned} \tag{2.8.1}$$

A diferencia del valor encontrado para  $u$  las derivadas anteriores son magnitudes absolutas. Esto significa que si en un sistema dado las derivadas son nulas entonces serán nulas

en cualquier otro sistema. Por lo tanto, dos o más observadores estarán de acuerdo en afirmar que la partícula está acelerada.

## 2.9 Aceleración uniforme

La definición newtoniana del movimiento de una partícula uniformemente acelerada es

$$\frac{du}{dt} = \text{constante} \quad (2.9.1)$$

Esta definición no es apropiada en el marco de la teoría de la Relatividad Especial, ya que entre otras cosas implicaría que  $u \rightarrow \infty$  si  $t \rightarrow \infty$ . Adoptaremos una definición diferente y diremos que *la aceleración es uniforme si a cada instante toma el mismo valor medida desde un sistema inercial que se mueve a la misma velocidad que la partícula*. Esto significa que si la velocidad de la partícula en el tiempo  $t$  es  $u(t)$ , respecto a un sistema inercial  $S$ , en un sistema inercial  $S'$  que se mueva respecto a  $S$  con velocidad  $v = u(t)$  la velocidad de la partícula relativa a  $S'$  será igual a cero y en consecuencia la aceleración vista en ese sistema es constante. Si llamamos  $a$  a esa constante, entonces podemos escribir, utilizando las definiciones de la sección anterior, con  $u_1 = u = v$ ,  $u_2 = u_3 = 0$  y  $du_2/dt = du_3/dt = 0$

$$\begin{aligned} \frac{du'}{dt'} &= \frac{1}{\beta^3 \left(1 - \frac{u^2}{c^2}\right)^3} \frac{du}{dt} \\ &= \beta^3 \frac{du}{dt} \end{aligned} \quad (2.9.2)$$

de donde resulta

$$\frac{du}{dt} = \frac{a}{\beta^3} \quad (2.9.3)$$

ya que  $du'/dt'$  es igual a la constante  $a$ .

Para resolver esta ecuación escribimos

$$adt = du\beta^3 \quad (2.9.4)$$

e integrando en el intervalo  $(t_0, t)$

$$\begin{aligned} \int adt &= \int \frac{du}{\left(1 - u^2/c^2\right)^{3/2}} \\ &= \int d \left[ \frac{u}{\left(1 - u^2/c^2\right)^{1/2}} \right] \end{aligned} \quad (2.9.5)$$

obtenemos

$$a(t - t_0) = u\beta. \quad (2.9.6)$$

Como  $\beta$  es una función de  $u$ , ya que así hemos definido la velocidad de  $S'$  respecto a  $S$ , podemos resolver la ecuación obtenida y escribir para  $u$  la expresión

$$u = a(t - t_0) \sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}} \quad (2.9.7)$$

y despejando el valor de  $u$  escribimos

$$u = \frac{dx}{dt} = \frac{a(t-t_0)}{\sqrt{\left[1 + \frac{a^2(t-t_0)^2}{c^2}\right]}} \quad (2.9.8)$$

Ahora podemos integrar respecto a  $t$

$$\int dx = \int dt \frac{a(t-t_0)}{\sqrt{\left[1 + \frac{a^2(t-t_0)^2}{c^2}\right]}} \quad (2.9.9)$$

Luego de efectuar un cambio de variables de la forma

$$w = \frac{a(t-t_0)}{c} \quad (2.9.10)$$

seguido del cambio de variables

$$y = w^2 \quad (2.9.11)$$

la integral se escribe

$$\int dx = \frac{c^2}{2a} \int_0^{\frac{a^2(t-t_0)^2}{c^2}} dy \frac{1}{\sqrt{1+y}} \quad (2.9.12)$$

y su resultado es

$$(x-x_0) = \frac{c}{a} \sqrt{\left[c^2 + a^2(t-t_0)^2\right]} - \frac{c^2}{a} \quad (2.9.13)$$

Esta ecuación se puede re-escribir de manera muy sencilla pasando el término independiente del tiempo a la izquierda y tomando cuadrados en ambos lados de la igualdad. El resultado es

$$\frac{(x-x_0+b)^2}{b^2} - \frac{(ct-ct_0)^2}{b^2} = 1 \quad (2.9.14)$$

donde hemos definido  $b = \frac{c^2}{a}$ . Esta es la ecuación de una hipérbola en el espacio de variables  $(x, ct)$ . Si tomamos  $(x_0 = b, t_0 = 0)$  resulta

$$\frac{x^2}{b^2} - \frac{(ct)^2}{b^2} = 1 \quad (2.9.15)$$

y esta ecuación define una familia de hipérbolas, para diferentes valores de  $a$ . En definitiva, este resultado muestra que las líneas de universo de una partícula uniformemente acelerada, en la teoría de la Relatividad Especial, corresponden a hipérbolas en el plano  $(x, ct)$ .

## 2.10 Resumen del capítulo.

- *Derivación formal de las transformaciones de Lorentz.*
- *Propiedades matemáticas de las transformaciones de Lorentz.*
- *Contracción espacial.*
- *Dilatación temporal.*

- *Tiempo propio.*
- *Transformación de velocidades.*
- *El concepto de aceleración en la Relatividad Especial.*
- *Aceleración uniforme.*

## 2.11 Problemas

1. Recopilar información y describir el experimento de Michelson y Morley.
2. Considere una partícula cuya vida media es de  $2 \times 10^{-6}$  seg. ¿Cuál será la vida media respecto a un observador que ve a la partícula moverse con una velocidad  $v = 0.9 c$ ?
3. Un muón se forma en la alta atmósfera y viaja a  $v = 0.99 c$ , recorriendo  $5 km$  antes de decaer.
  - a) ¿Cuánto vive este muón según un observador que se encuentra a nivel del mar y cuánto en su propio sistema de referencia?
  - b) ¿Cuál es el espesor de atmósfera que atraviesa, medido en su propio sistema de referencia?
4. Considerando que las líneas de universo de una partícula relativista, uniformemente acelerada, son hipérbolas, construya las correspondientes líneas de universo en el límite no relativista.

## Capítulo 3

# MECÁNICA RELATIVISTA

### 3.1 Introducción

Ya hemos analizado en el primer Capítulo los alcances y limitaciones de la Primera Ley de Newton, en relación a los postulados de la teoría de la Relatividad Especial. En este Capítulo veremos la forma en que la Segunda Ley de Newton se modifica en el contexto de la Teoría de la Relatividad Especial. Una de las consecuencias inmediatas de la Segunda Ley de Newton es el concepto de *masa inercial*, que para una partícula es igual a la razón entre la fuerza aplicada y el cambio de la velocidad con respecto al tiempo. Veremos que esta definición y las correspondientes a la energía y al momento y a las leyes de conservación, deben ser modificadas de acuerdo a los postulados relativista.

### 3.2 Elementos de Mecánica Relativista

Consideremos la Segunda Ley de Newton y sus consecuencias a nivel de la conservación del momento de una partícula o de un sistema de partículas. Si suponemos que el cuerpo al que le aplicamos una fuerza  $F$  posee masa constante, resulta

$$F \equiv \frac{dp}{dt} = m \frac{dv}{dt} \quad (3.2.1)$$

Si en lugar de una partícula consideramos un sistema de partículas, la fuerza que actúa sobre una partícula dada, la  $i$ -ésima, se escribe

$$F_i = \frac{dp_i}{dt} \quad (3.2.2)$$

y esta fuerza es igual a la suma de la fuerza externa aplicada sobre la partícula  $F_i^{ext}$  y las fuerzas  $F_{ij}$  que las demás partículas ejercen sobre la partícula  $i$ -ésima

$$F_i = F_i^{ext} + \sum_j F_{ij} \quad (3.2.3)$$

por lo tanto, la derivada respecto al tiempo de la suma de los momentos  $p_i$  resulta dada por

$$\frac{d}{dt} \sum_i p_i = \sum_i F_i^{ext} + \sum_{ij} F_{ij} \quad (3.2.4)$$

De acuerdo a la Tercera Ley de Newton,

*A toda acción se le opone una reacción igual y contraria*

el término en la suma sobre los índices  $(i, j)$  se anula ya que

$$F_{ij} = -F_{ji} \quad (3.2.5)$$

de manera que la fuerza externa total  $F = \sum_i F_i^{ext}$  se puede expresar en función del cambio con el tiempo del momento total  $P = \sum_i p_i$ . Si en particular el sistema está aislado,

$$F = 0 \rightarrow P = \text{constante} \quad (3.2.6)$$

es decir, hemos enunciado la ley de conservación del momento para un sistema aislado. Para un dado proceso, por ejemplo: una colisión, que ocurra en ausencia de fuerzas externas netas tendremos, de acuerdo a la Segunda Ley de Newton

$$P_{final} = P_{inicial} \quad (3.2.7)$$

Veremos a continuación las modificaciones de estos conceptos y leyes de conservación en la teoría de la Relatividad Restringida. Adoptaremos primero una forma sencilla de tratar el problema, basada en consideraciones físicas. En el siguiente capítulo re-visitaremos esos mismos conceptos en el marco de una formulación tensorial.

### 3.3 Masa Relativista

Parecería razonable pensar que si las mediciones de longitud y tiempos son dependientes del observador también existan otras magnitudes físicas cuyas mediciones dependan del observador. Tal es el caso de la masa de una partícula. Supondremos que la *masa relativista* de una partícula que se mueve a velocidad  $u$  respecto a un observador inercial  $S$  es una función de  $u$

$$m = m(u) \quad (3.3.1)$$

de manera que nuestro objetivo es ahora determinar la dependencia funcional en forma explícita. Para ello consideraremos el caso de dos partículas idénticas que chocan en forma inelástica. Se trata de describir el choque desde dos sistemas inerciales  $S$  y  $S'$ . Desde el punto de vista de  $S$ , si una de las partículas está en reposo en  $S$  y la otra posee una velocidad  $u$  en el momento del choque, entonces sus masas relativistas serán  $m(u=0) = m_0$  y  $m(u)$ . Después del choque la masa del sistema combinado será  $M(U)$  y se moverá con velocidad  $U$ . Si el sistema  $S'$  lo fijamos en el centro de masa del sistema de las dos partículas para el observador en  $S'$  ambas partículas se mueven con velocidades iguales y en sentidos opuestos.  $S'$  observará que después del choque la velocidad del sistema combinado es cero y por consiguiente la masa observada será  $M_0 = M(U=0)$ . Si suponemos la conservación del momento y de la masa relativista, ya que a diferencia con la mecánica newtoniana no pedimos la conservación de la masa sino la conservación de la masa relativista, resulta, en el sistema  $S$

$$\begin{aligned} m(u) + m_0 &= M(U) \\ m(u)u + 0 &= M(U)U \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

y si eliminamos  $M(U)$  en esas ecuaciones el resultado es

$$m(u) = m_0 \frac{U}{(u - U)} \quad (3.3.3)$$

La partícula incidente tiene velocidad  $U$  relativa a  $S'$ , quien a su vez tiene velocidad  $U$  respecto a  $S$ , por lo tanto la suma de ambas velocidades debe ser igual a la velocidad  $u$ , tal como es medida por  $S$ . Entonces, componiendo ambas velocidades, usando la ley de composición de velocidades que ya hemos discutido resulta

$$\begin{aligned} u &= \frac{U + U}{(1 + UU/c^2)} \\ &= \frac{2U}{(1 + U^2/c^2)} \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

de modo que ahora podemos determinar el valor de  $U$ , como función de  $u$ , y reemplazarlo en la expresión de  $m(u)$ . El resultado es

$$U^2 - \left(\frac{2c^2}{u}\right)U + c^2 = 0 \quad (3.3.5)$$

cuyas raíces son

$$U = \frac{c^2}{u} \left[ 1 \pm \left( 1 - \frac{u^2}{c^2} \right)^{1/2} \right] \quad (3.3.6)$$

En el límite  $u \rightarrow 0$  el valor de  $U$  debe ser finito. En consecuencia sólo la solución con signo  $(-)$  en el corchete tiene sentido físico de manera que podemos escribir, combinando (3.3.3) y (3.3.6), para  $m(u)$

$$m(u) = m_0 \gamma \quad (3.3.7)$$

donde

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (3.3.8)$$

Esta expresión relaciona el valor de la masa en reposo de una partícula  $m_0$  con el valor de su masa relativista  $m(u)$ . Notemos que el factor de proporcionalidad  $\gamma$  depende de la velocidad de la partícula relativa a un observador inercial  $S$ . Si bien este factor tiene la misma forma que el factor  $\beta$  que encontramos al estudiar las transformaciones de Lorentz, la velocidad que aparece en él no es la velocidad relativa entre los sistemas  $S$  y  $S'$  sino la velocidad de la partícula respecto a  $S$ . La figura 3.1 nos muestra la dependencia de la masa relativista con la velocidad de la partícula y se puede apreciar el significado de  $c$  como una velocidad límite.

### 3.4 Energía Relativista

Si expandimos la expresión para la masa relativista

$$m(u) = \gamma m_0 = m_0 (1 - u^2/c^2)^{-1/2} \quad (3.4.1)$$

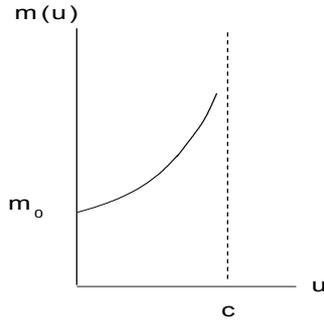


Figura 3.1: Masa relativista  $m(u)$ , como función de la velocidad  $u$  de la partícula. la curva representa la función  $m(u) = m_0\gamma$ , donde  $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-(u/c)^2}}$ .

suponiendo que la velocidad  $u$  es mucho más pequeña que  $c$  obtenemos

$$m(u) = m_0 + \frac{1}{2} \frac{m_0 u^2}{c^2} + O(u^4/c^4) \quad (3.4.2)$$

donde  $O(u^4/c^4)$  significa que los términos que no hemos escrito contienen potencias iguales o superiores al valor indicado entre paréntesis. A partir de este resultado, multiplicando por  $c^2$ , tenemos

$$mc^2 \approx m_0 c^2 + \frac{1}{2} m_0 u^2 + \dots = \text{constante} + \text{energía cinética newtoniana} \quad (3.4.3)$$

Por lo tanto, vemos que la expresión de la masa relativista contiene la energía cinética clásica newtoniana

$$T = \frac{1}{2} m_0 u^2 \quad (3.4.4)$$

y la energía en reposo

$$m_0 c^2 \quad (3.4.5)$$

Como ejemplo de aplicación de este concepto, analizaremos el caso de dos partículas, cuyas masas en reposo son  $m(1)_0$  y  $m(2)_0$ , que se mueven con velocidades  $v_1$  y  $v_2$  antes de chocar y cuyas velocidades después de chocar son  $u_1$  y  $u_2$ . La conservación de la masa relativista exige

$$m(1)_0 \gamma(v_1) + m(2)_0 \gamma(v_2) = m(1)_0 \gamma(u_1) + m(2)_0 \gamma(u_2) \quad (3.4.6)$$

Si suponemos que las velocidades  $u_j$  y  $v_j$  son pequeñas respecto a  $c$  y expandiendo los factores  $\gamma(v_j)$  y  $\gamma(u_j)$  obtenemos

$$\frac{1}{2} m(1)_0 v_1^2 + \frac{1}{2} m(2)_0 v_2^2 = \frac{1}{2} m(1)_0 u_1^2 + \frac{1}{2} m(2)_0 u_2^2 \quad (3.4.7)$$

que es la condición newtoniana usual que establece la conservación de la energía cinética total, antes y después del choque. Por lo tanto podemos considerar que la expresión

$$E = mc^2 \quad (3.4.8)$$

representa la energía de una partícula en la teoría de la Relatividad Especial. En el próximo capítulo veremos que este resultado se puede obtener en forma sencilla re-escribiendo las ecuaciones de la teoría utilizando notación tensorial. Una manera conveniente de expresar este resultado es la siguiente:

*El cambio en la energía de una partícula es igual al cambio de su masa relativista.*

El término  $m_0c^2$  es la *energía en reposo* de la partícula y su presencia en la definición de la energía es un efecto puramente relativista. La conservación del momento también puede expresarse de la manera anterior y toma la forma

$$m(1)_0v_1 + m(2)_0v_2 = m(1)_0u_1 + m(2)_0u_2 \quad (3.4.9)$$

Estas expresiones, junto a las correspondientes a la conservación de la masa relativista, constituyen la base de la Mecánica Relativista. En consecuencia, para una partícula que se mueve con velocidad  $u$  respecto a un sistema inercial  $S$ , su masa relativista, su energía y su momento están dados por

$$\begin{aligned} m &= \gamma m_0 \\ E &= mc^2 \\ p &= mu \end{aligned} \quad (3.4.10)$$

respectivamente. Si expresamos estas relaciones en función de las componentes del impulso lineal de la partícula, resulta

$$\frac{E^2}{c^2} - p^2 = m_0^2c^2 \quad (3.4.11)$$

que es un invariante para todos los observadores inerciales.

Este resultado, Ec.(3.4.11), es muy importante ya que nos indica que la magnitud cuyas componentes son  $(E/c, p)$  se comporta con respecto a las transformaciones de Lorentz de la misma manera que la magnitud cuyas componentes son  $(ct, x, y, z)$ . Por lo tanto, si tomamos un sistema inercial  $S'$  que se mueve con velocidad  $v$  respecto al sistema  $S$  y aplicamos las transformaciones de Lorentz al vector  $(E/c, p_x, p_y, p_z)$  obtenemos el vector transformado  $(E'/c, p'_x, p'_y, p'_z)$

$$\begin{aligned} E' &= \beta(E - vp_x) \\ p'_x &= \beta(p_x - vE/c^2) \\ p'_y &= p_y \\ p'_z &= p_z \end{aligned} \quad (3.4.12)$$

y en forma análoga, para realizar el pasaje inverso, reemplazamos  $v$  por  $-v$ , obteniéndose

$$\begin{aligned} E &= \beta(E' + vp'_x) \\ p_x &= \beta(p'_x + vE'/c^2) \\ p_y &= p'_y \\ p_z &= p'_z \end{aligned} \quad (3.4.13)$$

Tomemos como caso especial a  $S'$  como el sistema donde la partícula se encuentra instantáneamente en reposo. En este sistema

$$p' = 0 \quad , \quad E' = m_0 c^2 \quad (3.4.14)$$

y en consecuencia

$$\begin{aligned} E &= \beta E' \\ &= \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \\ &= m c^2 \end{aligned} \quad (3.4.15)$$

Estos valores son exactamente los mismos que hemos obtenido anteriormente, reemplazando  $u$  por  $v$  en las expresiones generales.

### 3.5 El efecto Doppler

La observación de diversos fenómenos que implican la detección de ondas emitidas por fuentes en movimiento, muestra que las longitudes de onda detectadas difieren de las longitudes de onda emitidas. Si la fuente se aleja del observador, se observa un corrimiento hacia longitudes de onda mayores, mientras que si la fuente se acerca al observador el corrimiento se verifica hacia longitudes de onda menores. Consideremos una fuente de luz monocromática cuya emisión corresponde a la longitud de onda  $\lambda_0$  en el sistema  $S'$  donde la fuente está en reposo. Consideremos un sistema  $S$  respecto al cual la fuente se mueve con velocidad radial  $u_r$ . Si dos pulsos sucesivos se emiten en el intervalo de tiempo  $dt'$ , medido en el sistema  $S'$ , la distancia que esos pulsos deben viajar hasta ser detectados difiere en la cantidad  $u_r dt'$  (ver Figura 3.2). Como los pulsos viajan a la velocidad de la luz serán detectados en  $S$  con una diferencia

$$\Delta t = \Delta t' + \frac{u_r \Delta t'}{c} \quad (3.5.1)$$

de donde resulta

$$\frac{\Delta t}{\Delta t'} = 1 + \frac{u_r}{c} \quad (3.5.2)$$

Si ahora usamos

$$\lambda = c \Delta t \quad \lambda_0 = c \Delta t' \quad (3.5.3)$$

y relacionamos ambas longitudes de onda, obtenemos la expresión clásica newtoniana para el efecto Doppler

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} = 1 + \frac{u_r}{c} \quad (3.5.4)$$

La expresión relativista para el efecto Doppler se calcula a partir del valor del intervalo de tiempo, entre pulsos, en  $S$

$$\Delta t = \gamma \left( \Delta t' + \frac{u_r \Delta t'}{c} \right) \quad (3.5.5)$$

y por consiguiente

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} = \gamma \left( 1 + \frac{u_r}{c} \right) \quad (3.5.6)$$

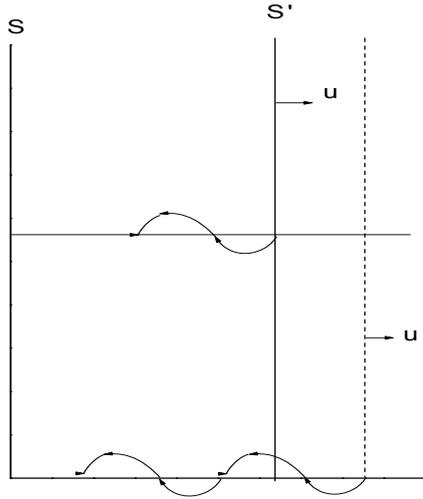


Figura 3.2: Emisión de luz monocromática desde una fuente en movimiento

donde  $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$ . Si la velocidad de la fuente es puramente radial, como hemos supuesto,  $u_r = v$  y por la definición de  $\beta$  resulta

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} = \left( \frac{1 + v/c}{1 - v/c} \right)^{1/2} \quad (3.5.7)$$

Notemos que la expresión relativista del efecto Doppler predice un corrimiento aún para el caso  $u_r = 0$ , como tendríamos si la fuente se moviera, por ejemplo, en órbita alrededor del observador. Este corrimiento, *efecto Doppler transversal*, es un efecto puramente relativista, consecuencia de la dilatación temporal, y ha sido verificado experimentalmente.

### 3.6 Fotones

Veremos a continuación cómo los conceptos de energía y momento relativistas, junto a la formulación del efecto Doppler relativista, nos permiten entender la hipótesis de Planck. Hacia el final del siglo XIX y comienzos del XX, se planteó un conflicto importante entre los resultados teóricos y los experimentales, en la investigación del comportamiento de la radiación en volúmenes cerrados. Volveremos sobre este problema al estudiar las leyes de radiación y el comportamiento del llamado cuerpo negro. Por el momento digamos que para resolver esos conflictos Planck propuso que la luz, y en general toda radiación electromagnética, puede ser descrita como compuesta por paquetes de energía, a los que llamó cuantos. Planck supuso, además, que la energía de cada cuanto depende de su frecuencia  $\nu$  a través de la relación :

$$E = h\nu \quad (3.6.1)$$

donde  $h$  es una constante universal, la constante de Planck. El concepto de cuanto de energía fue desarrollado posteriormente por Einstein, como veremos más adelante al dis-

cutir su explicación del efecto fotoeléctrico. Este concepto es el pilar de una nueva forma de describir la naturaleza: la mecánica cuántica, cuyos elementos básicos veremos en la segunda parte del libro. Las consecuencias que ésta hipótesis ha tenido en la física fueron dramáticas, ya que su extensión como parte de una teoría posibilitó la explicación del espectro del átomo de hidrógeno (modelo atómico de Bohr), además del ya mencionado efecto fotoeléctrico. Un aspecto particularmente importante de la teoría cuántica de la luz es el carácter dual onda-partícula asociado a ella. Esto significa que fenómenos tales como la interferencia y la difracción pueden ser descriptos considerando a la luz como una onda mientras otros fenómenos, como el efecto fotoeléctrico o la interacción de la radiación con átomos, pueden ser explicados considerando a la luz como a una partícula. La descripción de la luz como partícula consiste en tratarla como una corriente de cuantos llamados *fotones*. Si tomamos la definición de masa en reposo y reemplazamos  $u = c$  obtenemos

$$m_0 = \frac{m}{\gamma} = 0 \quad (3.6.2)$$

es decir, *la masa en reposo del fotón es nula*. Si consideramos la dirección de propagación de un fotón como definida por el vector unitario  $\vec{n}$  su impulso se escribe  $\vec{p} = p\vec{n}$  y en consecuencia, su energía resulta dada por

$$E^2 = p^2 c^2 \quad (3.6.3)$$

de donde, tomando la raíz cuadrada resulta:

$$E = pc \quad (3.6.4)$$

Si ahora combinamos este resultado con el correspondiente a la hipótesis de Planck, obtenemos

$$pc = h\nu \quad (3.6.5)$$

que expresa que

*El momento de un fotón está relacionado a su frecuencia y la relación entre ambas cantidades es una constante, cuyo valor es independiente del observador.*

Veamos de qué manera este resultado es compatible con la Teoría de la Relatividad Especial. Si escribimos la expresión para el efecto Doppler, reemplazando las longitudes de onda por las frecuencias, (recordemos que  $\nu = c/\lambda$ ), obtenemos

$$\frac{\nu_0}{\nu} = \left( \frac{1 + v/c}{1 - v/c} \right)^{1/2} \quad (3.6.6)$$

Si la fuente emite un pulso de luz con una energía total  $E_0$ , en la dirección negativa de  $x$ , de modo que  $p' = (p'_x, 0, 0) = -E_0/c$ , el observador  $S$  detectará una energía  $E$

$$\begin{aligned} E &= \beta \left( E_0 - \frac{vE_0}{c} \right) \\ E &= E_0 \left( \frac{1 - v/c}{1 + v/c} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (3.6.7)$$

Si relacionamos (3.6.6) y (3.6.7), podemos escribir

$$\frac{E}{\nu} = \frac{E_0}{\nu_0} \quad (3.6.8)$$

Por lo tanto, la relación entre la energía y la frecuencia posee un valor independiente del observador. De acuerdo con (3.6.1) ese valor es precisamente la constante de Planck,  $h$ . La constante de Planck posee unidades de acción (=unidades de energía por unidades de tiempo) y su valor medido es  $h = 6.62608 \times 10^{-34} \text{ Joules} \times \text{seg}$ . Una definición que se utiliza frecuentemente es la llamada constante reducida:  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ .

### 3.7 Resumen del capítulo

- *Elementos de Mecánica Relativista y su comparación con la Mecánica Newtoniana.*
- *Masa Relativista.*
- *Energía Relativista.*
- *El efecto Doppler.*
- *Fotones.*

### 3.8 Problemas

1. Una partícula cuya masa en reposo es  $m_0c^2 = 1 \text{ MeV}$  y cuya energía cinética es igual a  $2 \text{ MeV}$  choca con una partícula en reposo, de  $m'_0c^2 = 2 \text{ MeV}$ . Después de la colisión las partículas quedan adheridas. Hallar en forma clásica y en forma relativista:
  - a) La velocidad de la primera partícula antes del choque,
  - b) la energía total de la primera partícula antes del choque,
  - c) el momento total inicial del sistema,
  - d) la energía cinética total después del choque,
  - e) la masa en reposo del sistema después del choque.
2. Una partícula de masa  $m_1$  choca elásticamente con una partícula de masa  $m_2$ , inicialmente en reposo. Después del choque, ambas partículas adquieren energías diferentes, y las direcciones de sus velocidades forman ángulos  $\alpha$  y  $\beta$  con la dirección original de la partícula incidente. Analice el problema en forma clásica y en forma relativista. ¿Cuál es el valor límite para  $\alpha + \beta$  ?
3. En un acelerador lineal se generan haces de positrones y de electrones y se los hace chocar. En el sistema de referencia del laboratorio, cada haz está formado por una secuencia de paquetes de onda, donde cada paquete tiene  $1 \text{ cm}$  de largo y  $10 \mu\text{m}$  de diámetro. En la región de colisión cada partícula tiene una energía de  $50 \text{ GeV}$ , y los electrones y los positrones se mueven en sentidos opuestos.
  - a) ¿Qué ancho y qué longitud tiene cada paquete en su propio sistema de referencia?
  - b) ¿Cuál debe ser la longitud propia mínima para que un paquete tenga sus dos extremos simultáneamente dentro del acelerador en su propio sistema de referencia? Considere que la longitud real del acelerador es del orden de los  $1000 \text{ mts}$ .

- c) ¿Cuál es la longitud del paquete de positrones en el sistema de referencia de los electrones?
4. a) Se ha observado radiación cósmica con una energía de 16 joules ( $1.2 \times 10^{20} \text{ eV}$ ). Si la partícula que lleva esa energía es un protón ( $m_0 c^2 \approx 1 \text{ GeV}$ ), ¿cuánto tarda en cruzar nuestra galaxia (el diámetro de nuestra galaxia es del orden de  $10^5$  años luz) de acuerdo a lo que mediría un reloj que se mueve con el protón?.
- b) ¿Cuántas veces su energía en reposo debería tener una partícula elemental para que el diámetro de nuestra galaxia fuera visto por ella contraído al diámetro de la partícula ( $\cong 1 \text{ fm} = 10^{-13} \text{ cm.}$ )? ¿cuánta masa debe convertir en energía un protón para tener la velocidad deseada?.
5. El sol rota una vez sobre su eje cada 24.7 días. El radio del sol es de  $7 \times 10^8 \text{ m}$ . Calcule el corrimiento Doppler para luz de longitud de onda  $\lambda = 5000 \text{ \AA} = 5000 \times 10^{-10} \text{ m}$  que se origina al borde del disco del ecuador solar.
6. Determine el valor de la energía cinética relativista, T. Cuál es la relación entre T y la energía cinética de la mecánica clásica ?. Demuestre gráficamente la relación entre ambas magnitudes.

## Capítulo 4

# FORMULACIÓN TENSORIAL

### 4.1 Introducción

En este capítulo presentaremos las nociones más elementales del cálculo tensorial, que es la herramienta adecuada para la formulación de la Teoría de la Relatividad Especial. Comenzaremos con las reglas usuales de las operaciones entre vectores en el espacio Euclídeo y las generalizaremos para el caso de representaciones en el espacio de Minkowski.

### 4.2 Vectores

En mecánica newtoniana es usual trabajar en la notación vectorial y esa es una forma adecuada para compactar ecuaciones y realizar operaciones. Definimos el espacio vectorial euclídeo de tres dimensiones como el conjunto de puntos  $P$  a los que asignamos los números reales  $(x, y, z)$  tales que

$$r_P = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k} \quad (4.2.1)$$

es el vector asociado a  $P$ . Los vectores  $(\hat{i}, \hat{j}, \hat{k})$  forman una terna de vectores unitarios, asociados a los tres ejes coordenados. Las componentes  $(x, y, z)$  son, en general, funciones del tiempo y esto nos permite escribir las ecuaciones de movimiento en forma vectorial, como vimos en el capítulo anterior. A continuación presentaremos las operaciones elementales entre vectores.

### 4.3 Operaciones entre vectores

El producto escalar entre vectores en el espacio de tres dimensiones

$$r_P \cdot r_Q = x_P x_Q + y_P y_Q + z_P z_Q \quad (4.3.1)$$

es una medida del valor de la proyección de un vector sobre otro. Si  $\theta_{PQ}$  es el valor del ángulo entre los vectores  $r_P$  y  $r_Q$ , el producto escalar puede escribirse también como

$$r_P \cdot r_Q = |r_P| |r_Q| \cos \theta_{PQ}. \quad (4.3.2)$$

En particular, el producto

$$r_P \cdot r_P = x_P^2 + y_P^2 + z_P^2, \quad (4.3.3)$$

representa el valor del cuadrado del módulo del vector, de manera que si al punto  $P$  hemos asociado un vector de componentes  $(x, y, z)$  el módulo del vector representa la distancia desde el origen del sistema de coordenadas,  $(0, 0, 0)$ , al punto  $P$  y su valor es

$$|r_P| = \sqrt{x_P^2 + y_P^2 + z_P^2}. \quad (4.3.4)$$

Análogamente, el cuadrado de la distancia  $l$ , entre dos puntos  $P$  y  $Q$ , se define

$$\begin{aligned} l_{PQ}^2 &= (r_P - r_Q) \cdot (r_P - r_Q) \\ &= \sum_{i=1}^3 (x_i(P) - x_i(Q))^2 \\ &= (x_P - x_Q)^2 + (y_P - y_Q)^2 + (z_P - z_Q)^2, \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

y representa el valor del cuadrado del módulo del vector diferencia  $(\vec{r}_P - \vec{r}_Q)$ .

El producto vectorial

$$r_P \times r_Q = (y_P z_Q - z_P y_Q) \hat{i} + (-x_P z_Q + x_Q z_P) \hat{j} + (x_P y_Q - y_P x_Q) \hat{k},$$

es un vector perpendicular al plano determinado por los vectores  $r_P$  y  $r_Q$ , cuyo módulo es igual al valor del área limitada por estos vectores

$$|r_P \times r_Q| = |r_P| |r_Q| \sin \theta_{PQ}. \quad (4.3.6)$$

El producto escalar es conmutativo

$$r_P \cdot r_Q = r_Q \cdot r_P, \quad (4.3.7)$$

el producto vectorial es anticonmutativo

$$r_P \times r_Q = -r_Q \times r_P \quad (4.3.8)$$

y ambos productos son asociativos respecto a la suma vectorial.

$$\begin{aligned} a \cdot (b + c) &= a \cdot b + a \cdot c \\ a \times (b + c) &= a \times b + a \times c, \end{aligned} \quad (4.3.9)$$

La suma de vectores se expresa

$$a + b = (x(a) + x(b)) \hat{i} + (y(a) + y(b)) \hat{j} + (z(a) + z(b)) \hat{k}. \quad (4.3.10)$$

y la multiplicación de vectores y números reales

$$a = \lambda b \quad (4.3.11)$$

representan dilataciones o contracciones de los vectores. El vector nulo está definido a partir de la suma entre vectores como

$$a + (-a) = 0. \quad (4.3.12)$$

Estas definiciones completan las operaciones necesarias para especificar el espacio vectorial. Notemos que la definición de las componentes de un vector requiere de la especificación de un índice

$$x \equiv (x, y, z) \equiv x_i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (4.3.13)$$

que se asocia a cada componente del vector. Notemos, además, que el índice desaparece al multiplicar escalarmente dos vectores y su uso se conserva si la operación involucrada es el producto vectorial.

## 4.4 Trayectorias

La definición de una trayectoria en el espacio vectorial de tres dimensiones, corresponde a la imposición de vínculos (restricciones) sobre los valores del conjunto de coordenadas  $(x, y, z)$  asignadas a  $P$ . Estas restricciones se pueden expresar mediante relaciones entre las coordenadas, en general

$$f(x, y, z, s) = 0, \quad (4.4.1)$$

donde  $s$  representa el conjunto de parámetros que definen el vínculo. La función  $f$  puede depender de un número menor o igual de variables que las correspondientes a la definición del vector y por lo tanto puede expresar restricciones en un espacio cuyas dimensiones son menores que las del espacio original.

## 4.5 Transformaciones entre vectores

Una transformación  $M(\alpha)$  es una operación que asigna a un vector  $x$  otro vector  $x'$  tal que

$$x' = M(\alpha)x + \beta \quad (4.5.1)$$

y su estructura explícita depende de los valores de los parámetros de la transformación,  $\alpha$ , y de  $\beta$ , que representa un desplazamiento. Si expresamos la operación anterior en función de las componentes de ambos vectores, tenemos

$$x'_i = (M(\alpha)x)_i + \beta_i \quad (4.5.2)$$

de manera que la operación  $M(\alpha)x$ , en general, se puede expresar como una combinación de las componentes  $(x, y, z)$  del vector  $x$ . Si asignamos índices a esta operación, la composición de índices implícita en la definición de la transformación significa que  $M$  puede ser:

- i) un escalar y por lo tanto no posee índices;
- ii) un vector, posee un índice, y puede multiplicar a  $x$  escalar o vectorialmente;
- o
- iii) es una matriz de dos índices, uno de los cuales se multiplica por el índice asociado a las componentes de  $x$ .

Si adoptamos esta notación a índices podemos escribir

$$x'_i = \sum_{j=1}^3 M_{ij}x_j + \beta_i \quad (4.5.3)$$

o, en forma matricial

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix} \quad (4.5.4)$$

En esta notación, el desplazamiento  $x' \rightarrow x + \beta$  se escribe

$$x'_i = \sum_{j=1}^3 \delta_{ij}x_j + \beta_i, \quad (4.5.5)$$

es decir, la representación matricial de  $M$  es una matriz diagonal, ya que  $\delta_{ij} = 1$  si  $i = j$  o  $\delta_{ij} = 0$  si  $i \neq j$ . Si la representación buscada corresponde a la dilatación o contracción del vector  $x$  a la que se le suma el vector  $\beta$ , tenemos

$$x'_i = \sum_{j=1}^3 \delta_{ij} \lambda_j x_j + \beta_i. \quad (4.5.6)$$

En particular, una dada transformación  $R$  entre dos sistemas de coordenadas se corresponde a la operación  $P(x', y', z') = R(P(x, y, z)) = P(R(x, y, z))$ . Esta operación se aplica al conjunto de coordenadas originalmente asignadas a  $P$  y produce un nuevo conjunto de coordenadas. Estos nuevos valores representan las coordenadas de  $P$  según el nuevo sistema.

Es conveniente expresar las transformaciones en forma diferencial. Si  $dx'$  corresponde al cambio diferencial en el sistema  $S'$ , tenemos, en la notación a componentes

$$dx'_i = \sum_j \frac{\partial x'_i}{\partial x_j} dx_j. \quad (4.5.7)$$

La matriz de transformación es la matriz que tiene por elementos  $J_{ij}$

$$J_{ij} = \frac{\partial x'_i}{\partial x_j}, \quad (4.5.8)$$

y en consecuencia

$$dx'_i = \sum_j J_{ij} dx_j. \quad (4.5.9)$$

Las transformaciones entre sistemas coordenados son no singulares, es decir existen las transformaciones inversas y los índices especifican una dada orientación de los ejes coordenados. En otras palabras, para estas transformaciones debe cumplirse

$$\det J_{ij} \neq 0. \quad (4.5.10)$$

Veamos cómo estos conceptos se generalizan en el caso de una representación tensorial.

Un tensor es un objeto definido en una entidad denominada *variedad*. De manera simple una variedad es algo que localmente se parece a un sector del espacio euclídeo ( $R^{(n)}$ ) de  $n$ -dimensiones. Diremos que la variedad  $M^{(n)}$  es el conjunto de puntos  $P$  tales que cada uno posee un conjunto de coordenadas  $(x^1, x^2, x^3, \dots, x^n)$  asociadas. (En general, una propiedad de  $M^{(n)}$  es que no es posible o bien puede no ser posible representar todos sus puntos mediante la asignación de coordenadas de un único sistema de coordenadas). Un ejemplo típico es el conjunto de puntos que pueden ser cubiertos por un sistema de coordenadas polares  $(r, \phi)$ . El origen de ese sistema es un punto para el que el ángulo  $\phi$  está indeterminado. Análogamente, si pensamos en la superficie de una esfera como en una variedad, podemos distinguir dos sistemas característicos (hemisferios) y una zona de superposición (ecuador).

La definición de curvas en la variedad se corresponde con la definición de curva en el espacio ordinario,

$$x^a \equiv x^a(u) \quad (4.5.11)$$

donde  $a = 1, 2, \dots, n$ .

En forma análoga, una hiper-superficie se define en función de  $m = n - 1$  coordenadas, etc.

A partir del conjunto de coordenadas asociadas a cada punto  $P$  perteneciente a  $M^{(n)}$  es posible efectuar transformaciones que nos conducen a otro conjunto de coordenadas

$$x'^a = f^a(x^1, x^2, x^3, \dots, x^n) \quad (4.5.12)$$

La matriz de  $n \times n$  cuyos elementos son las derivadas parciales

$$\frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \quad (4.5.13)$$

es la matriz que define la transformación y en función de estos elementos las derivadas totales respecto a cada una de las coordenadas transformadas se escriben

$$dx'^a = \sum_{b=1}^n \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} dx^b \quad (4.5.14)$$

Es común, por lo reiterado de su aparición, que las sumas sobre índices repetidos se escriban en forma compacta

$$\sum_{b=1}^n \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} dx^b = \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} dx^b \quad (4.5.15)$$

prescindiendo del símbolo de sumatoria. Esta es la convención de Einstein y la adoptaremos en lo sucesivo.

En general, definiremos un tensor como una entidad geométrica que obedece ciertas propiedades de transformación. Consideremos los puntos  $P(x^a)$  y  $Q(x^a + dx^a)$  a los que asociamos el desplazamiento infinitesimal  $PQ$ , que no es un vector libre. Si  $dx^a$  representa la variación de las coordenadas en  $S$  y  $dx'^a$  representa la variación de las coordenadas en  $S'$ , entonces, como hemos visto

$$dx'^a = \left[ \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \right]_P dx^b \quad (4.5.16)$$

Definiremos el *vector contravariante*, o *tensor contravariante de rango 1* como el conjunto de cantidades  $X^a$  en el sistema de coordenadas  $(x^a)$  asociadas al punto  $P$  que se transforma de acuerdo a

$$X'^a = \left[ \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \right]_P X^b \quad (4.5.17)$$

Notemos que los elementos de la matriz de transformación se calculan en el punto  $P$ . De manera análoga, un *tensor contravariante de rango 2, 3, ... k* se define a partir del producto de transformaciones

$$X'^{ab\dots k} = \left[ \frac{\partial x'^a}{\partial x^c} \right]_P \left[ \frac{\partial x'^b}{\partial x^d} \right]_P \dots \left[ \frac{\partial x'^k}{\partial x^l} \right]_P X^{cd\dots l} \quad (4.5.18)$$

Un *tensor covariante de rango n* se define a partir de la transformación inversa

$$X'_{ab\dots k} = \left[ \frac{\partial x^c}{\partial x'^a} \right]_P \left[ \frac{\partial x^d}{\partial x'^b} \right]_P \dots \left[ \frac{\partial x^l}{\partial x'^k} \right]_P X_{cd\dots l} \quad (4.5.19)$$

Análogamente, podemos definir *tensores mixtos* con  $k$  índices contravariantes y  $j$  índices covariantes

$$X'^{a\dots}_{b\dots} = \left[ \frac{\partial x'^a}{\partial x^c} \right]_P \left[ \frac{\partial x^d}{\partial x'^b} \right]_P \dots X^c_{d\dots} \quad (4.5.20)$$

A la estructura definida como variedad se la puede dotar de una métrica y esta nueva estructura se conoce con el nombre de *variedad de Riemann*. Para ello, podemos elegir cualquier tensor covariante de rango 2, simétrico frente al intercambio de índices y definir el *intervalo* o *distancia infinitesimal* entre los puntos  $P(x^a)$  y  $Q(x^a + dx^a)$  como

$$(ds)^2 = g_{ab}(x) dx^a dx^b \quad (4.5.21)$$

En esta expresión  $g_{ab}(x)$  es el tensor covariante de rango 2 cuyos elementos están definidos en el punto  $x$  al que se le asignaron las coordenadas  $x^a$ . En lo sucesivo, prescindiremos de los paréntesis e indicaremos el cuadrado del intervalo como  $ds^2$ . En general, la *norma* de un vector contravariante se escribe

$$X^2 = g_{ab}(x) X^a X^b \quad (4.5.22)$$

de manera que un vector contravariante de norma nula satisface la relación

$$g_{ab}(x) X^a X^b = 0 \quad (4.5.23)$$

Si  $g$  es el determinante de la matriz correspondiente al tensor covariante  $g_{ab}$ , tensor de la métrica (o simplemente *métrica*), diremos que la métrica es no-singular si  $\det(g_{ab}) \neq 0$ . En correspondencia con la métrica covariante, la métrica contravariante se define a partir de la relación

$$g_{ab} g^{bc} = \delta_a^c \quad (4.5.24)$$

El símbolo  $\delta_a^c$  es un tensor mixto y se lo conoce como símbolo de Krönecker o  $\delta$  de Krönecker. Ambas métricas se utilizan, a su vez, para subir o bajar índices de un tensor. Si tomamos un vector (i.e., un tensor de rango 1) resulta

$$\begin{aligned} T^a &= g^{ab} T_b \\ T_a &= g_{ab} T^b \end{aligned} \quad (4.5.25)$$

expresión que es fácilmente generalizable para el caso de tensores de rango superior. Aplicando este concepto podemos demostrar que

$$T^a T_a = T_a T^a \quad (4.5.26)$$

Definiremos el espacio de Minkowski, a partir de la variedad de Riemann con  $n = 4$ , donde a cada punto le asignamos el conjunto de coordenadas

$$(x^a) \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z) \quad (4.5.27)$$

y donde el intervalo toma la forma

$$ds^2 = \eta_{ab} dx^a dx^b \quad (4.5.28)$$

La métrica  $\eta$  está dada por las componentes del tensor  $\eta$

$$\eta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.5.29)$$

y por lo tanto

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2 \quad (4.5.30)$$

Si definimos intervalos por medio de la relación

$$X^2 = g_{ab} X^a X^b \quad (4.5.31)$$

el valor resultante puede ser positivo, negativo o nulo y diremos que el intervalo es tipo *temporal* ( $X^2 > 0$ ), tipo *espacial* ( $X^2 < 0$ ) o tipo *nulo* o *luminoso* ( $X^2 = 0$ ).

En notación tensorial podemos expresar las transformaciones entre sistemas de coordenadas en la forma

$$\begin{aligned} x^a &\rightarrow x'^b \\ x'^a &= L_b^a x^b \end{aligned} \quad (4.5.32)$$

donde

$$L_b^a = \frac{\partial x'^a}{\partial x^b} \quad (4.5.33)$$

En particular, podemos escribir las transformaciones que dejan invariante la métrica, y que por lo tanto dejan invariante el intervalo, si

$$\eta_{cd} = L_c^a \eta_{ab} L_d^b \quad (4.5.34)$$

ya que

$$\begin{aligned} ds'^2 &= \eta_{ab} dx'^a dx'^b \\ &= \eta_{ab} L_c^a dx^c L_d^b dx^d \\ &= (L_c^a \eta_{ab} L_d^b) dx^c dx^d \\ &= \eta_{cd} dx^c dx^d \\ &= ds^2 \end{aligned} \quad (4.5.35)$$

Veremos a continuación de qué manera estas expresiones nos permiten re-obtener las correspondientes a la teoría de la Relatividad Especial.

## 4.6 Formulación tensorial

Partimos de la definición del *tetrvector* posición, que es el tensor contravariante de rango 1

$$x^\mu \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3) = (x^0, x) \quad (4.6.1)$$

y que, como hemos visto, corresponde a la asignación de coordenadas a un dado punto  $P$  en el espacio de Minkowski. Aquí hemos escrito  $x^0 = ct$  y  $x = (x^1, x^2, x^3) = (x, y, z)$ .

El correspondiente tensor covariante se escribe

$$x_\mu \equiv (x^0, -x^1, -x^2, -x^3) = (x^0, -x) \quad (4.6.2)$$

y se obtiene a partir de la operación

$$x_\mu = \eta_{\mu\nu} x^\nu \quad (4.6.3)$$

De manera que el intervalo toma la forma del producto

$$x_\mu x^\mu = c^2 t^2 - x^2 \quad (4.6.4)$$

Este intervalo es invariante frente a transformaciones de la forma

$$x'^\mu = L^\mu_\nu x^\nu \quad (4.6.5)$$

que dejan invariante la métrica  $\eta$ , ya que

$$x'_\mu x'^\mu = x_\mu x^\mu \quad (4.6.6)$$

por directa aplicación de los resultados anteriores:

$$\begin{aligned} x'_\mu x'^\mu &= \eta_{\mu\nu} x'^\nu x'^\mu \\ &= \eta_{\mu\nu} L^\nu_\alpha x^\alpha L^\mu_\beta x^\beta \\ &= L^\nu_\alpha \eta_{\mu\nu} L^\mu_\beta x^\alpha x^\beta \\ &= \eta_{\beta\alpha} x^\alpha x^\beta \\ &= x_\alpha x^\beta \end{aligned} \quad (4.6.7)$$

En particular, si consideramos una transformación que nos lleve desde un intervalo dado a uno tipo *temporal*,

$$c^2 d\tau^2 = c^2 dt^2 - dx^2 \quad (4.6.8)$$

donde, por sencillez, hemos escrito  $dx^2$  para indicar la suma de los cuadrados de las componentes espaciales ( $dx, dy, dz$ ). Si consideramos que el tiempo  $\tau$  es la medida del tiempo en el sistema de referencia fijo al reloj, la expresión anterior es simplemente la definición del tiempo propio

$$d\tau = dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (4.6.9)$$

y por lo tanto

$$\tau = \int_{t_0}^t dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (4.6.10)$$

A partir de estos resultados podemos establecer la correspondencia que buscamos entre los resultados esenciales de la teoría de la Relatividad Especial y su formulación covariante.

El tetravector velocidad es el tensor contravariante de rango 1, definido vía

$$u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau} \quad (4.6.11)$$

y expresa la variación respecto al tiempo propio del tetravector posición, y sus componentes son

$$u^\mu \equiv (c\gamma, \gamma u) \quad (4.6.12)$$

donde, como antes, hemos adoptado la notación vectorial para indicar las componentes espaciales. Naturalmente, el factor  $\gamma$  toma el valor

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (4.6.13)$$

Por consiguiente, la definición del tetraimpulso

$$\begin{aligned} p^\mu &= m_0 u^\mu \\ &= (p^0, p) \\ &= (mc, mu) \\ &= (m_0 \gamma c, m_0 \gamma u) \end{aligned} \quad (4.6.14)$$

nos permite re-obtener en forma sencilla las expresiones correspondientes a la masa relativista y a la energía relativista. La componente temporal del tetraimpulso es entonces

$$p^0 = m_0 c \gamma = mc = \frac{E}{c} \quad (4.6.15)$$

El valor de la energía relativista  $E = mc^2$  se puede calcular a partir del producto

$$p_\mu p^\mu \quad (4.6.16)$$

que es una cantidad invariante frente a las transformaciones de Lorentz, tal como lo es el intervalo  $x_\mu x^\mu$ . El valor explícito de este producto, para cualquier observador inercial, está dado por

$$\begin{aligned} p_\mu p^\mu &= \eta_{\mu\alpha} p^\mu p^\alpha \\ &= \gamma^2 (m_0^2 c^2 - m_0^2 u^2) \\ &= m_0^2 c^2 \gamma^2 \left(1 - \frac{u^2}{c^2}\right) \\ &= m_0^2 c^2 \end{aligned} \quad (4.6.17)$$

Si ahora expresamos este mismo resultado en función de las componentes de  $p^\mu$  tenemos

$$\begin{aligned} p_\mu p^\mu &= \frac{E^2}{c^2} - p^2 \\ &= m_0^2 c^2 \end{aligned} \quad (4.6.18)$$

y a partir de este resultado, la energía relativista toma la forma

$$E^2 = m_0^2 c^4 + c^2 p^2 \quad (4.6.19)$$

y ésta es la expresión que hemos obtenido en el capítulo anterior (ec.(3.4.11)).

La expresión

$$F^\mu = \frac{dp^\mu}{d\tau} \quad (4.6.20)$$

define la tetra-fuerza, en correspondencia con el concepto newtoniano de fuerza.

Con estos resultados podemos establecer el cuadro de comparación entre las magnitudes propias de la Mecánica Newtoniana y las de la Relatividad Especial

	<i>Mecanica Newtoniana</i>	<i>Relatividad Especial</i>
<i>Espacio</i>	<i>Euclideo</i>	<i>Minkowski</i>
<i>Mtrica</i>	(1, 1, 1)	(1, -1, -1, -1)
<i>Transformacin</i>	<i>Galileo</i>	<i>Lorentz</i>
<i>Entes</i>	<i>vectores</i>	<i>tetra - vectores</i>
<i>Posicin</i>	<i>x</i>	
<i>Tiempo</i>	<i>t</i>	$x^\mu(x^0, x)$
<i>Momento</i>	$p = m_0 \frac{dx}{dt}$	$p^\mu = m_0 \frac{dx^\mu}{d\tau}$
<i>Masa</i>	$m_0$	$m = m_0 \gamma(u)$
<i>Fuerza</i>	$f = \frac{dp}{dt}$	$f^\mu = \frac{dp^\mu}{d\tau}$
<i>Energía</i> (partícula libre)	<i>cintica</i> $T = \frac{p^2}{2m_0}$	<i>relativista</i> $E = mc^2$

## 4.7 Leyes de conservación energía-impulso

En correspondencia con el concepto newtoniano, escribimos, para el tetra-momento de un sistema de N partículas

$$P^\mu = \sum_{k=1}^N p_k^\mu \quad (4.7.1)$$

Si el sistema es un sistema aislado

$$\frac{dP^\mu}{d\tau} = 0 \quad (4.7.2)$$

y a partir de esta expresión podemos determinar las ecuaciones que rigen la conservación de la energía-impulso en la teoría de la Relatividad Especial. Las componentes espaciales y temporales del tetra-momento

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N p_k &= P \\ \sum_{k=1}^N \frac{E_k}{c} &= \frac{E}{c} \end{aligned} \quad (4.7.3)$$

no son independientes, ya que, para cada partícula

$$E_k = \left[ \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2} \right]_k \quad (4.7.4)$$

Para ilustrar estas expresiones, consideremos el caso de dos partículas, cuyas masas en reposo son iguales  $m_0(1) = m_0(2) = m_0$ . Una de las partículas está en reposo,  $u_1 = 0$ , y la otra se mueve hacia ella con velocidad constante  $u_2 = u$ . Las partículas chocan y

como resultado del choque emerge una partícula, cuya masa en reposo  $M_0$  y velocidad  $U$  se desea determinar, así

$$\begin{aligned} m_0\gamma(u)c + m_0c &= M_0\gamma(U)c \\ m_0\gamma(u)u &= M_0\gamma(U)U \end{aligned} \quad (4.7.5)$$

de donde

$$\begin{aligned} U &= u \frac{\gamma(u)}{1 + \gamma(u)} \\ M_0 &= m_0 \frac{\gamma(u) + 1}{\gamma(U)} \end{aligned} \quad (4.7.6)$$

En casos mas generales, las expresiones para la energía relativista y para las componentes espaciales del momento están acopladas y su determinación requiere un poco más de elaboración que en el ejemplo anterior pero el concepto es el mismo: a diferencia del caso newtoniano, donde conocido el momento de una partícula o sistema de partículas es inmediato calcular la energía cinética, en la teoría de la Relatividad Especial ambas cantidades forman parte del tetra-vector momento y su estimación requiere de la solución de un sistema de ecuaciones acopladas.

## 4.8 Resumen del capítulo

- *Vectores, operaciones y espacio vectorial euclídeo.*
- *Tensores, operaciones, métrica, espacio de Minkowski.*
- *Tetra-vectores y Relatividad Especial.*
- *Ecuaciones características: tetra-impulso, tetra-fuerza.*
- *Leyes de conservación energía-impulso para un sistema aislado relativista.*

## 4.9 Problemas

1. Escribir la ecuación correspondiente a un intervalo si la parte espacial se define en un sistema de coordenadas esféricas. Escriba el valor del intervalo y construya la métrica adecuada.
2. Demostrar que el intervalo espacio-temporal es invariante frente a las transformaciones de Lorentz.
3. ¿Cómo se transforman las componentes de la tetra-fuerza? Comparar con las expresiones correspondientes a la aceleración.
4. ¿Cuál es el límite no-relativista de las expresiones correspondientes a la tetrafuerza y a la aceleración ?

5. Un fotón se mueve en el plano  $xy$  del sistema de laboratorio, en una dirección que forma un ángulo  $\phi$  con el eje  $x$ , de manera que sus componentes de momento son  $p_x = p \cos(\phi)$ ,  $p_y = p \sin(\phi)$  y  $p_z = 0$ .
- a) Usando la transformación de Lorentz para el tetravector  $p^\mu$ , y la relación  $E^2 - p^2 = 0$  para un fotón, determine su energía en un sistema de referencia que se mueve con velocidad  $v$  en la dirección del eje  $x$  respecto del sistema de laboratorio,  $S'$ . ¿Cuál es la dirección de movimiento del fotón en  $S'$ ?
- b) Si la frecuencia de la luz en el sistema de laboratorio es  $\nu$ , ¿cuál es la frecuencia de la luz en  $S'$ ? (Efecto Doppler Relativista).
6. Un rayo gama (fotón muy energético), puede tener una energía mayor a la energía en reposo de un par positrón-electrón. Pruebe que
- a) el siguiente proceso es incompatible con las leyes de conservación de momento y energía en el sistema de laboratorio:

$$\gamma \longrightarrow e^+ + e^-,$$

- b) dado que en presencia de materia, el proceso anterior es posible, ¿cuál es el umbral de energía necesario para que sea posible la siguiente reacción?

$$\gamma + e^-(en\ reposo) \longrightarrow e^+ + 2e^-.$$

La energía en reposo del electrón y del positrón es 0.511 MeV.

7. Un positrón  $e^+$  de energía cinética  $T$  es aniquilado en un blanco que contiene electrones  $e^-$  que se encuentran en reposo en el sistema de laboratorio

$$e^+ (muy\ energticos) + e^- (en\ reposo) \longrightarrow \gamma,$$

a) considerando la colisión en el sistema de referencia de centro de masa (sistema de referencia en el cual el momento total inicial de las partículas es cero), muestre que resultan al menos dos rayos gama como consecuencia de la aniquilación del par electrón-positrón,

b) obtenga una expresión para la energía de uno de los rayos gama en el sistema de laboratorio como función del ángulo en que emergió el rayo gama y la dirección que viajó el positrón antes de su aniquilación.

8. Obtenga una expresión para  $M_0$ , Ec. (4.7.6), en función de la velocidad  $u$ .

## Capítulo 5

# FENÓMENOS CUÁNTICOS

### 5.1 Introducción

En este capítulo estudiaremos un conjunto de fenómenos cuya explicación requiere del uso de conceptos que se apartan de los conceptos clásicos, es decir de las explicaciones basadas en la Mecánica Newtoniana, el Electromagnetismo o la Termodinámica. La observación y posterior explicación de fenómenos tales como el comportamiento termodinámico de la radiación electromagnética en una cavidad (Planck, 1900), el efecto fotoeléctrico (Einstein, 1905), el efecto Compton (Compton, 1923), señalan el comienzo de una nueva forma de explicar los fenómenos de la naturaleza a escala atómica. La importancia de la, por entonces novedosa, descripción (en adelante nos referiremos a ella denominándola *descripción cuántica*) se vio dramáticamente demostrada en la explicación de la estructura del átomo de hidrógeno (modelo atómico de Bohr (1913)), en el estudio del comportamiento de los calores específicos en la cercanía del cero absoluto (Nerst, 1920) y en el descubrimiento del spin (Gerlach, Unlebeck, 1925).

La formulación definitiva de la Mecánica Cuántica, y la exploración de sus aplicaciones a un conjunto amplio de fenómenos a escala molecular, atómica y nuclear, se concretó durante un par de décadas en trabajos desarrollados por E. Schrödinger (1926), W. Heisenberg (1926), P. A. M. Dirac (1928) y R. Feynmann (1948))

Las dificultades existentes entre los conceptos clásicos y los resultados experimentales, evidenciadas a partir de 1900, son las siguientes:

a) Estructura de la materia: Rutherford midió la dispersión de partículas cargadas sobre láminas delgadas. Las trayectorias de dispersión obtenidas experimentalmente indicaron que la materia está formada, básicamente, por cargas positivas localizadas rodeadas de cargas negativas. Este resultado experimental muestra que la teoría electromagnética clásica no puede ser utilizada para describir la estructura observada, ya que cargas de distinto signo se atraen y por lo tanto cualquier distribución de materia debería emitir radiación y al cabo de un cierto tiempo colapsar. Finalmente, las determinaciones experimentales de Rutherford mostraron que la materia no puede ser descrita mediante una distribución homogénea de cargas positivas y negativas, como lo postulaba el modelo de Thompson.

b) Interacción de la radiación con la materia: Compton midió corrimientos en las longitudes de onda de la radiación incidente sobre materia, resultado que sugiere una forma de interacción donde ambos participantes, ondas y partículas, comparten propiedades afines. De esta manera, los intercambios de energía y de momento entre ondas y partículas se producirían como si ambos presentaran tanto propiedades ondulatorias como corpusculares.

c) La interacción entre radiación y materia produce intercambios de energía y de momento que se apartan drásticamente de las leyes clásicas, sugiriendo la existencia de cuantos de energía. Estas interacciones están regidas por leyes de conservación no-clásicas.

d) Las leyes de la termodinámica estadística clásica no explican la distribución de intensidades de la radiación proveniente de una cavidad mantenida a temperatura constante. Mientras la teoría clásica establece una relación del tipo  $E \approx T$ , los resultados experimentales indican una dependencia del tipo  $E \approx T^4$  entre la densidad de energía y la temperatura absoluta.

## 5.2 Efecto fotoeléctrico

Si una superficie metálica se ilumina con luz visible se liberan partículas cargadas, *siempre que la frecuencia de la radiación incidente supere cierto valor umbral*. Las características del fenómeno, denominado *efecto fotoeléctrico* son las siguientes (Figura 5.1):

i) *la energía de las partículas emitidas no depende de la intensidad de la radiación absorbida por la superficie, pero el número de partículas emitidas (corriente) aumenta al aumentar la intensidad de la radiación,*

ii) *la energía cinética máxima de las partículas emitidas, tal como se la determina mediante la aplicación de potenciales de frenado, depende de la frecuencia de la luz incidente y es diferente para diferentes materiales,*

iii) *la emisión de partículas no depende del tiempo de exposición de la superficie a la radiación incidente y ocurre al cabo de algunos nanosegundos luego de iniciada la exposición.*

La explicación de estas características se puede establecer si adoptamos la hipótesis de Einstein, referida al balance de energía

$$h\nu - \phi = T \quad (5.2.1)$$

De acuerdo a la explicación de Einstein la luz incidente, cuya frecuencia es  $\nu$ , transporta la cantidad de energía  $h\nu$ ,  $\phi$  es el potencial que caracteriza a la superficie emisora y  $T$  es la energía cinética máxima de las partículas emitidas.

El valor de  $\phi$  determina el valor de la frecuencia umbral

$$h\nu_0 = \phi \quad (5.2.2)$$

y sólo cuando la luz incidente posee una frecuencia mayor que  $\nu_0$  el material emite

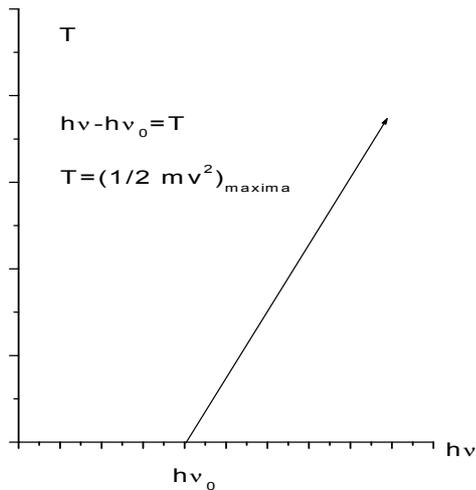


Figura 5.1: Dependencia de la energía cinética máxima de los electrones emitidos con respecto a la frecuencia de la luz incidente

partículas cuya energía cinética máxima es

$$T = h(\nu - \nu_0) \quad (5.2.3)$$

De acuerdo a la hipótesis de Einstein la energía transportada por las ondas está concentrada en cantidades elementales, *cuantos*, de valor  $h\nu$ . Esto quiere decir que sobre el frente de ondas la distribución de energía no es continua, como supone la teoría clásica de la radiación. Este resultado está ligado a otro resultado teórico relevante, referido al comportamiento termodinámico de la radiación, como veremos más adelante en este capítulo al presentar la hipótesis de Planck y formular la descripción de la radiación del cuerpo negro. En el Capítulo 3, mostramos que  $h\nu$  es precisamente el valor de la energía asociada a una partícula, el fotón, cuya masa en reposo es nula. Esta energía, en el modelo de Einstein, es la energía transportada por la radiación incidente, que es absorbida en el metal y produce la emisión de electrones con energía cinética máxima  $T$  por encima de la energía umbral  $h\nu_0$ . El proceso de absorción de energía no es acumulativo, como se demostró experimentalmente, según los resultados (i) e (ii). Este es el punto crítico en la interpretación de Einstein, ya que contradice la noción clásica de continuidad en el transporte de energía.

### 5.3 Efecto Compton

Como aplicación de los conceptos relativistas de conservación de la energía-impulso y de la asignación de momento al fotón, estudiaremos la dispersión de un fotón por un electrón en reposo (Figura 5.2). De acuerdo al esquema mostrado en la figura, el fotón incide sobre el electrón y lo arranca de su situación de reposo transfiriéndole momento. El fotón dispersado pierde parte de su momento y de su energía. El experimento consiste

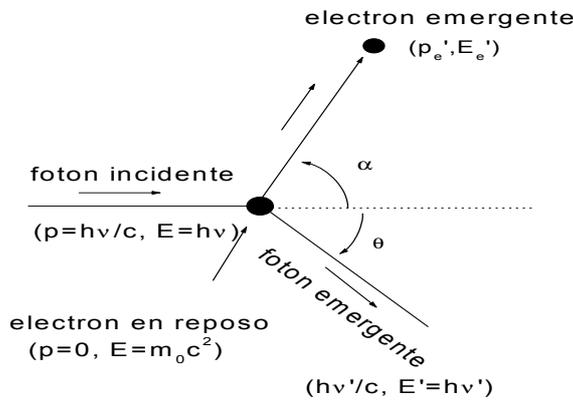


Figura 5.2: Representación de la interacción electron-fotón, en el efecto Compton. El fotón incidente es dispersado por el electrón, que adquiere momento a expensas del cambio de frecuencia del fotón

en la medición de la distribución angular del fotón emergente. Se observa, además, un corrimiento de la frecuencia del fotón emergente respecto al incidente.

Si llamamos  $\lambda'$  a la longitud de onda emergente,  $\lambda$  a la longitud de onda incidente (suponemos que la fuente es monocromática) y  $\theta$  al ángulo que forma la radiación emergente con el semieje positivo  $\hat{x}$  el resultado experimental es el siguiente

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos \theta) \quad (5.3.1)$$

donde la cantidad  $\frac{h}{m_0c}$  es la llamada *longitud de onda Compton* del electrón, cuya masa en reposo es  $m_0$ . Notemos que este es un resultado muy especial, ya que relaciona parámetros puramente *ondulatorios*, como las longitudes de onda, con magnitudes propias de las partículas, como la masa en reposo  $m_0$ .

Las ecuaciones correspondientes a la conservación de las componentes espaciales del momento y a la conservación de la energía relativista se escriben (ver Figura 5.2)

$$\begin{aligned} \frac{h\nu}{c} &= p_e \cos \alpha + \frac{h\nu'}{c} \cos \theta \\ 0 &= p_e \sin \alpha - \frac{h\nu'}{c} \sin \theta \\ h\nu + E(p_e = 0) &= h\nu' + E(p_e) \end{aligned} \quad (5.3.2)$$

La primera ecuación describe la conservación de la componente del momento según  $\hat{x}$ , la segunda según  $\hat{y}$  y la tercera corresponde a la conservación de la energía relativista. Los ángulos  $\alpha$  y  $\theta$  son los ángulos que forman, con el semieje positivo  $x$ , los momentos del electrón y del fotón emergentes, respectivamente.

Si partimos de la última línea y despejamos  $E(p_e)$ , la energía relativista del electrón saliente, obtenemos

$$E(p_e) \equiv \sqrt{p_e^2 c^2 + m_0^2 c^4} = h(\nu - \nu') + m_0 c^2 \quad (5.3.3)$$

Tomando el cuadrado de ambos miembros resulta

$$p_e^2 = \left[ \frac{h(\nu - \nu')}{c} \right]^2 + 2m_0 h(\nu - \nu') \quad (5.3.4)$$

Si ahora tomamos el cuadrado de las ecuaciones que describen la conservación de las componentes espaciales del momento del sistema, tenemos

$$\begin{aligned} \left( \frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu'}{c} \cos \theta \right)^2 &= p_e^2 \cos^2 \alpha \\ \left( \frac{h\nu'}{c} \sin \theta \right)^2 &= p_e^2 \sin^2 \alpha \end{aligned} \quad (5.3.5)$$

y sumando ambas igualdades obtenemos

$$p_e^2 = \left( \frac{h\nu}{c} \right)^2 + \left( \frac{h\nu'}{c} \right)^2 - 2 \left( \frac{h\nu}{c} \right) \left( \frac{h\nu'}{c} \right) \cos \theta \quad (5.3.6)$$

Iguando las expresiones para  $p_e^2$ , en (5.3.4) y (5.3.6), resulta

$$\begin{aligned} \left[ \frac{h(\nu - \nu')}{c} \right]^2 + 2m_0 h(\nu - \nu') &= \\ \left( \frac{h\nu}{c} \right)^2 + \left( \frac{h\nu'}{c} \right)^2 - 2 \left( \frac{h\nu}{c} \right) \left( \frac{h\nu'}{c} \right) \cos \theta & \end{aligned} \quad (5.3.7)$$

desarrollando el cuadrado en el término de la izquierda y cancelando términos idénticos a ambos lados de la igualdad obtenemos

$$\frac{h^2 \nu \nu'}{c^2} (1 - \cos \theta) = m_0 c \left( \frac{h\nu}{c} - \frac{h\nu'}{c} \right) \quad (5.3.8)$$

de donde, finalmente, podemos establecer la igualdad (recordando que  $\nu = \frac{c}{\lambda}$ )

$$(1 - \cos \theta) = \frac{m_0 c}{h} (\lambda' - \lambda) \quad (5.3.9)$$

y a partir de ella podemos obtener la expresión para el corrimiento de la longitud de onda

$$\frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta) = (\lambda' - \lambda) \quad (5.3.10)$$

que está de acuerdo con el resultado experimental (Ec.5.3.1). Esta expresión establece que la diferencia entre las longitudes de onda de la radiación incidente y la emergente es proporcional a la *longitud de onda Compton* del electrón

$$\frac{h}{m_0 c} = \lambda_{\text{Compton}} \quad (5.3.11)$$

cuyo valor depende exclusivamente de la masa en reposo del electrón. Si tomamos los valores conocidos para las constantes  $h$  y  $c$  y para  $m_0 c^2 = 511 \text{ keV}$ , resulta  $\lambda_{\text{Compton}} \approx 2.4 \times 10^{-12} \text{ m}$ , del orden de una centésima de Amström ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ).

## 5.4 Termodinámica de la radiación

Veremos a continuación otro ejemplo de apartamiento respecto a leyes clásicas. Se trata de describir el comportamiento de la radiación en equilibrio térmico con las paredes de una cavidad. Pensemos, por ejemplo, en la luz proveniente del calentamiento gradual de un trozo de metal, o en la luz proveniente del interior de un horno de fundición. En ambos casos la distribución espectral de la luz emitida cambia al cambiar la temperatura del trozo de metal o del horno. Clásicamente, la energía debe variar linealmente con la temperatura, pero, de acuerdo a los resultados experimentales:

a) *Ley de Stefan-Boltzmann*: la energía radiada varía según la cuarta potencia de la temperatura de la cavidad;

b) *Ley de Wien*: la distribución de intensidad de la radiación, como función de la longitud de onda de la radiación emitida, presenta máximos para valores constantes del producto de la temperatura absoluta por la longitud de onda correspondiente al máximo;

c) *Comportamientos límites*: la distribución espectral de intensidades no sigue un comportamiento exponencial uniforme y de acuerdo con el valor de la longitud de onda esta distribución toma formas polinómicas, para pequeñas longitudes de onda, o exponenciales, para grandes longitudes de onda.

Para entender estos resultados, de la manera en que fueron descriptos a comienzos del siglo pasado (Planck, 1900), recordaremos brevemente las nociones básicas del cálculo de valores medios en la teoría de distribuciones clásicas.

## 5.5 Elementos de la teoría de distribuciones

La descripción clásica de la trayectoria de una partícula, de acuerdo a las leyes de Newton, se basa en la determinación de la dependencia temporal de la posición y del momento. La integración de las ecuaciones de movimiento requiere, además del conocimiento de las fuerzas actuantes, el conocimiento de las condiciones iniciales. Si bien, en principio, el problema de una partícula puede resolverse en forma exacta, la situación se torna más complicada para el caso de un sistema de muchas partículas. Si se piensa en un mol de material el conocimiento de las condiciones iniciales implica fijar el valor de  $10^{24}$  posiciones y momentos y la resolución de un número comparable de ecuaciones de movimiento. La imposibilidad planteada en la descripción determinista de un sistema macroscópico llevó a la formulación de otra forma de descripción, la descripción *estadística*.

El esquema básico de la descripción estadística clásica es el siguiente:

i) En lugar de seguir la evolución temporal de cada componente (partícula) del sistema supondremos que cada uno de estos componentes puede acceder a todos los valores posibles de la posición y del momento. Si suponemos que el sistema evoluciona libremente y durante un tiempo suficientemente largo hacia su *estado de equilibrio*, este estado podrá definirse

a partir del promedio sobre las evoluciones de cada una de las componentes. Notemos que cualquier sistema macroscópico está compuesto por un número grande de subsistemas, que son, esencialmente, tan complejos como el mismo sistema. De esta manera, una posible representación del estado del sistema consistirá en la determinación de valores promedios a partir del *conjunto* de subsistemas o de réplicas del mismo sistema. Por ejemplo, un sistema de  $N$  partículas puede pensarse como  $N$  sub-sistemas independientes, formado cada uno de ellos por una partícula. Como cada componente (subsistema) puede adquirir todos los valores posibles de la posición y del momento, de acuerdo a la definición de su energía, el cálculo de promedios estadísticos puede realizarse considerando el número de subsistemas que poseen un dado conjunto de valores de la posición y del momento. En Mecánica Clásica se denomina *espacio de fases* al conjunto de todos los valores posibles de la posición y del momento. En este espacio de fases la evolución de cada subsistema se puede representar por medio de una función del momento y la posición, *la función de distribución*. El elemento de volumen en el espacio de fases es

$$d\Omega = d^3q d^3p / h_0^3 \quad (5.5.1)$$

donde la constante  $h_0$ , que posee unidades de acción, se introduce por razones dimensionales. Los resultados físicos no dependen de su valor, como demostraremos más adelante.

ii) Los valores accesibles de la posición  $q$  y del momento  $p$  son representados mediante variables aleatorias sujetas a leyes probabilísticas. La estructura de la ley de distribución del momento y de la posición es el elemento más importante de la descripción estadística, ya que los observables físicos se calculan a partir de los valores medios y desviaciones medias correspondientes a dicha ley, es decir, de acuerdo a la función de distribución.

iii) Los valores de los parámetros que caracterizan una dada ley de distribución definen también el *estado de equilibrio* del sistema. Estos parámetros se determinan en forma sencilla fijando los valores medios, desviaciones medias cuadráticas y los momentos de orden superior de la distribución, en correspondencia con las cantidades físicas que caracterizan al sistema.

Veamos de qué forma este esquema puede aplicarse para describir el estado de equilibrio de un sistema de partículas. Supongamos que las partículas están confinadas en el interior de un recipiente, a temperatura y presión constantes, y que no pueden atravesar las paredes del recipiente. Por el momento podemos despreocuparnos de efectos de tamaño finito y pensar en las partículas como puntuales. Estas son las condiciones que normalmente describen al sistema conocido como *gas ideal*. Excepto por la presencia de las paredes del recipiente, no actúan sobre las partículas fuerzas externas. En lugar de describir la forma en que una partícula dada se mueve dentro del recipiente, siguiendo la evolución de su posición y momento, consideraremos que *a priori* ella puede encontrarse en cualquier estado *accesible*. Si elegimos un intervalo, o *celda elemental*, alrededor de un dado par de valores  $(q, p)$  y registramos el número de veces que una partícula del sistema adquiere esta configuración obtendremos una medida de la frecuencia asociada a la configuración. Si el número de partículas es suficientemente grande y si el número de celdas elementales es también suficientemente grande, podemos reemplazar las frecuencias por *probabilidades*. De manera que la descripción estadística asigna a la posición y al momento el significado de variables aleatorias distribuidas según una cierta ley de distribución,  $f(q, p)$ , de manera

que la probabilidad asignada a la configuración, esto es: *la probabilidad de encontrar a la partícula en un estado cuya posición está en el intervalo  $(q, q + dq)$  y cuyo momento está en el intervalo  $(p, p + dp)$* , es:

$$P(q, p) = f(p, q)d^3q d^3p/h_0^3 \quad (5.5.2)$$

Si consideramos a la función  $f(p, q)d\Omega(p, q)$  como la función de distribución en el espacio de fases clásico, los valores característicos de una dada función  $O(p, q)$  de las coordenadas y momentos, se pueden calcular de la manera siguiente

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \frac{\int d\Omega(p, q)O(p, q)f(p, q)}{\int d\Omega(p, q)f(p, q)} \\ \sigma_O^2 &= \frac{\int d\Omega(p, q)f(p, q)(O(p, q) - \langle O \rangle)^2}{\int d\Omega(p, q)f(p, q)} \end{aligned} \quad (5.5.3)$$

que definen el valor medio y la dispersión cuadrática media de  $O(p, q)$ , respectivamente.

## 5.6 Distribuciones clásicas

En esta sección nos dedicaremos a presentar los fundamentos de la descripción estadística de sistemas compuestos por un número muy grande de partículas, a las que en primera aproximación podemos considerar libres o muy debilmente interactuantes. Tal es el caso del llamado *gas ideal*. En este sistema, la relación entre las llamadas variables termodinámicas y las variables puramente mecánicas (momento de las partículas) se puede calcular considerando, como lo hizo Maxwell, valores medios del momento. Para calcular estos valores medios debemos aplicar conceptos como los descritos en la sección anterior. Comenzaremos con el caso más simple, donde la variable de interés es la energía cinética media.

### 5.6.1 Distribución de Maxwell

La aplicación de conceptos probabilísticos a la descripción del comportamiento de un sistema de partículas tiene, como primer ejemplo, la llamada *ley de distribución de Maxwell*, que establece el valor de la distribución de velocidades para un sistema de partículas no interactuantes, de masa  $m$ , a la temperatura absoluta  $T$ . Si  $v$  es la velocidad de una partícula, la probabilidad asignada a ese valor es

$$f(v)dv = Ae^{-mv^2/2k_B T}v^2 dv \quad (5.6.1)$$

donde  $m$  es la masa de la partícula,  $T$  es la temperatura absoluta,  $k_B$  es la constante de Boltzmann, cuyo valor es  $k_B=1.38066 \cdot 10^{-23}$  joules/K y  $A$  es la constante de normalización de la distribución.

El valor de  $A$  se determina de acuerdo a la condición

$$\int f(v)dv = 1 \quad (5.6.2)$$

Efectuando el cambio de variables

$$u = \frac{mv^2}{2k_B T} \quad (5.6.3)$$

en la integral obtenemos

$$\begin{aligned} A \int e^{-mv^2/2k_B T} v^2 dv &= \frac{A}{2} \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^{3/2} \int e^{-u} u^{1/2} du \\ &= \frac{A}{2} \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^{3/2} \Gamma(3/2) \end{aligned} \quad (5.6.4)$$

En el resultado anterior hemos introducido la integral

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty dx x^{s-1} e^{-x} \quad (5.6.5)$$

que define la función gamma de argumento semientero  $\Gamma(s)$ . Estas funciones cumplen con la propiedad:  $\Gamma(s+1) = s\Gamma(s)$  y a partir del resultado  $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$  podemos generar la serie de valores  $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$ ,  $\Gamma(5/2) = 3\sqrt{\pi}/4$ , etc. Si el argumento de esta función es entero, entonces  $\Gamma(n+1) = n!$ . Finalmente

$$A \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{4} = 1 \quad (5.6.6)$$

de donde

$$A = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{m}{2k_B T} \right)^{3/2} \quad (5.6.7)$$

Algunos valores característicos, obtenidos con esta distribución, son el valor medio

$$\bar{v} = \int f(v) v dv = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^{1/2} \quad (5.6.8)$$

y el valor medio cuadrático

$$v_{rms}^2 = \bar{v}^2 = \int f(v) v^2 dv = \left( \frac{3k_B T}{m} \right) \quad (5.6.9)$$

La energía cinética media se determina a partir del valor de la velocidad media cuadrática,  $v_{rms}^2$ , ya que

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \frac{1}{2} m \int f(v) v^2 dv \\ &= \frac{1}{2} m v_{rms}^2 \\ &= \frac{3}{2} k_B T \end{aligned} \quad (5.6.10)$$

El valor más probable de la velocidad,  $v^*$ , se obtiene determinando el valor de la velocidad para el que la derivada de la distribución se anula,

$$\left[ \frac{df}{dv} \right]_{v^*} = 0 \quad (5.6.11)$$

La anulación de la derivada implica

$$\left[ v \left( 2 - \frac{mv^2}{k_B T} \right) \right]_{v=v^*} = 0 \quad (5.6.12)$$

y en consecuencia, ya que  $v^* \neq 0$ , resulta

$$v^* = \left( \frac{2k_B T}{m} \right)^{1/2} \quad (5.6.13)$$

### 5.6.2 Distribución de Maxwell-Boltzmann

Los resultados anteriores son especialmente significativos, en relación a la termodinámica clásica, ya que establecen la conexión entre parámetros macroscópicos, como la temperatura absoluta del sistema, y propiedades de las partículas, como la velocidad de las mismas. Veamos como se puede extender este estudio al caso de un sistema cuya densidad esta fija. Suponemos el movimiento de las partículas en un volumen dado. En general, la probabilidad clásica asignada a una trayectoria cuya energía es  $E(p, q)$ , con valores de  $p$  y  $q$  en la celda elemental localizada en  $(q, q + dq; p, p + dp)$  corresponde a la definición

$$f(p, q)d\Omega(p, q) = e^{-\beta E(p, q)} d^3q d^3p / h_0^3 \quad (5.6.14)$$

En el caso de un gas ideal clásico, la energía de la configuración  $(p, q)$  es de la forma

$$E(p, q) = e(p, q) - \mu \quad (5.6.15)$$

donde  $e(p, q) = \frac{p^2}{2m}$  y  $\mu$  es un parámetro cuyo valor determinaremos al fijar la densidad de partículas en el gas;  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  es la inversa del producto de la temperatura absoluta del sistema ( $T$ ) y de la constante de Boltzmann ( $k_B$ ).

Con estas definiciones, la distribución de Maxwell-Boltzmann se escribe

$$f(p, q)d\Omega(p, q) = \frac{d^3q}{h_0^3} 4\pi p^2 dp e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} e^{\beta\mu} \quad (5.6.16)$$

La distribución de Maxwell-Boltzmann está normalizada de acuerdo a la relación siguiente,

$$\begin{aligned} N &= \int f(p, q)d\Omega(p, q) \\ &= e^{\beta\mu} \int \frac{d^3q}{h_0^3} 4\pi p^2 dp e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} \end{aligned} \quad (5.6.17)$$

que fija el valor del parámetro  $\mu$  de manera de reproducir el correcto número de partículas,  $N$ . Si integramos, efectuando el cambio de variables

$$\begin{aligned} x &= \beta \frac{p^2}{2m} \rightarrow p = \sqrt{\frac{2mx}{\beta}} \\ dp &= dx \sqrt{\frac{m}{2\beta x}} \end{aligned} \quad (5.6.18)$$

resulta

$$N = e^{\beta\mu} \frac{V}{h_0^3} 4\pi \left(\frac{m}{\beta}\right)^{3/2} \sqrt{2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \quad (5.6.19)$$

La expresión para el número de partículas es, en consecuencia

$$N = e^{\beta\mu} V \left(\frac{2\pi m}{\beta h_0^2}\right)^{3/2} \quad (5.6.20)$$

y, a partir de la ecuación anterior resulta

$$\mu = kT \ln \left[ \left(\frac{\beta h_0^2}{2\pi m}\right)^{3/2} N/V \right] \quad (5.6.21)$$

De esta manera, podemos reemplazar el factor  $e^{\beta\mu}$  por su valor en la función de distribución, para cada valor de la densidad  $N/V$  y de la temperatura  $T$ . El resultado, luego de integrar  $f(p, q)$  en las coordenadas y reemplazar  $e^{\beta\mu}$  por su valor, es la función

$$f(x)dx = N \frac{2}{\sqrt{\pi}} x^{1/2} e^{-x} dx \quad (5.6.22)$$

donde  $x = \beta p^2/2m$ . La dependencia funcional de la distribución de Maxwell-Boltzmann se muestra en la Figura 5.3

El valor de la energía media por partícula,  $\bar{e} = \bar{E}/N$ , se obtiene integrando el valor de la energía de una partícula,  $e(p, q)$ , con la distribución  $f(p, q)$ . De esta manera obtenemos

$$\begin{aligned} \bar{e} &= \frac{\int f(p, q) \frac{p^2}{2m} d\Omega(p, q)}{\int d\Omega(p, q) f(p, q)} \\ &= e^{\beta\mu} \frac{V}{h_0^3} 4\pi \left(\frac{m}{\beta}\right)^{3/2} \frac{\sqrt{2}}{N\beta} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \end{aligned} \quad (5.6.23)$$

Usando  $\Gamma(5/2) = 3\sqrt{\pi}/4$ , y reemplazando  $e^{\beta\mu}$  por su valor,

$$e^{\beta\mu} = \frac{N}{V} \left(\frac{\beta h_0^2}{2\pi m}\right)^{3/2} \quad (5.6.24)$$

se obtiene

$$\bar{e} = \frac{3}{2} k_B T \quad (5.6.25)$$

La energía media de las  $N$  partículas se obtiene multiplicando (5.6.2) por  $N$  y está dada por

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \frac{3}{2} N k_B T \\ &= \frac{3}{2} n_{\text{molar}} R T \end{aligned} \quad (5.6.26)$$

donde  $R = N_{\text{Avogadro}} k_B$  es la constante universal de los gases. A partir de ésta expresión clásica, la energía por grado de libertad cuadrático y por partícula es igual a  $\frac{1}{2} k_B T$  y el calor específico a volumen constante es igual

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{dE}{dT} \\ &= \frac{3}{2} n_{\text{molar}} R \end{aligned} \quad (5.6.27)$$

Estos resultados constituyen la base de la termodinámica estadística. De acuerdo con los resultados anteriores, la distribución de Maxwell-Boltzmann constituye una buena distribución para la descripción de la termodinámica estadística en gases ideales. Sin embargo, su aplicación al estudio de la termodinámica de la radiación no conduce a resultados compatibles con los experimentos. Los resultados experimentales muestran que el comportamiento exponencial de la distribución de Maxwell-Boltzmann no reproduce el comportamiento observado de la distribución de intensidad de la radiación, que para un

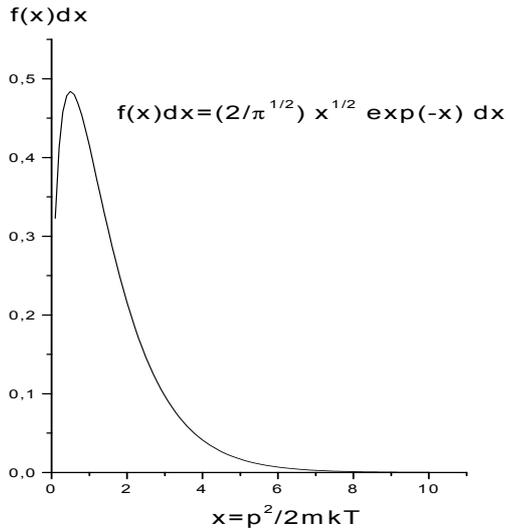


Figura 5.3: Distribución clásica de momentos, en función de la variable  $x = p^2/(2mkT)$ , para la densidad unidad.

dado valor de la temperatura absoluta y como función de la frecuencia aumenta de manera polinómica a bajas frecuencias y decrece exponencialmente para altas frecuencias. La imposibilidad de reproducir este comportamiento, sobre un rango amplio de frecuencias indica que la forma de la distribución debe necesariamente apartarse de la simple forma exponencial. El tratamiento riguroso del problema, en mecánica estadística cuántica, puede formularse a partir de la utilización de la distribución

$$f(E) = \frac{1}{e^{\beta E} - 1} \quad (5.6.28)$$

donde  $E$  es la energía del cuanto de radiación (fotón). Esta distribución, en el límite  $\beta E \gg 1$  toma la forma

$$f(E) \approx e^{-\beta E} \quad (5.6.29)$$

que es el valor correspondiente a la distribución de Maxwell-Boltzmann con  $\mu = 0$ , mientras que para  $\beta E \ll 1$  resulta

$$f(E) \approx \frac{1}{\beta E} \quad (5.6.30)$$

De manera que la presencia del factor  $-1$  en el denominador de la función de distribución permite, en principio, esperar un comportamiento sensiblemente dependiente del valor de la energía de la radiación. En capítulos próximos, cuando estudiemos los principios de la formulación cuántica, demostraremos rigurosamente los resultados anteriores. En este punto, siguiendo con esta presentación de las dificultades relacionadas con la explicación clásica del problema de la radiación de una cavidad, el llamado *problema del cuerpo negro*, discutiremos la propuesta de Planck y sus consecuencias.

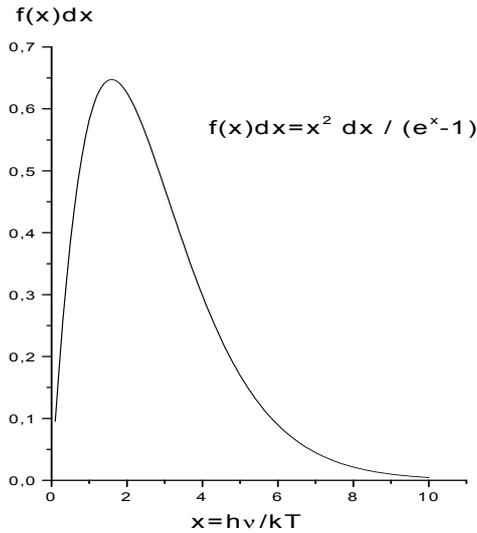


Figura 5.4: Distribución de frecuencias en una cavidad, como función de la variable adimensional  $h\nu/kT$ .

## 5.7 Distribución de Planck

Sabemos que los cuerpos calientes emiten luz. Si medimos la radiación proveniente de un horno, a través de un orificio pequeño practicado en una de sus paredes, obtendremos una distribución continua de longitudes de onda. Esta distribución presenta un máximo para un dado valor de la longitud de onda. Al aumentar la temperatura el máximo se desplaza hacia valores más pequeños de la longitud de onda, manteniéndose constante el valor del producto  $T\lambda_{\text{maximo}}$ . En el caso del horno, el calentamiento de las paredes producirá la emisión de radiación, esta radiación será re-absorbida y eventualmente las paredes del horno y la radiación contenida en la cavidad alcanzarán el estado de equilibrio a la temperatura absoluta  $T$ . En ese estado la distribución de energía en la cavidad será una cierta función de la frecuencia, o lo que es equivalente de la longitud de onda, de la radiación (Figura 5.4).

Los resultados experimentales son compatibles con:

a) la relación  $E \approx T^4$  para la energía de la radiación contenida en la cavidad (ley de Stefan-Boltzmann)

b) la distribución de longitudes de onda (o de frecuencias) en la cavidad posee un máximo para un cierto valor  $\lambda_m$  a la temperatura  $T$ . Si la temperatura varía, el nuevo máximo corresponderá a un valor  $\lambda'_m$ , a la temperatura  $T'$ , tal que  $\lambda_m T = \lambda'_m T' = \text{constante}$  (ley del corrimiento espectral o ley de Wien).

El tratamiento que Planck dió al problema se basó en la consideración de un sistema de osciladores armónicos, que representan a las partículas que componen las paredes de la cavidad, en equilibrio con el campo de radiación. El campo de radiación es la superposición de radiación de todas las frecuencias posibles. Supuso, además, que:

i) *los osciladores armónicos unidimensionales y el campo de radiación están en equilib-*

rio

ii) cada oscilador absorbe de manera continuada la energía proveniente del campo de radiación

iii) cada oscilador puede emitir energía sólo cuando su energía es un múltiplo entero de la cantidad  $h\nu$

El postulado (iii) rompe drásticamente con la noción clásica, en lo relacionado a la emisión de energía en el continuo de valores y discretiza, *cuantifica*, el valor de la energía que un oscilador puede emitir.

Si suponemos que la distribución de probabilidad asociada a la emisión de energía  $E = h\nu$  sigue una ley clásica, como la distribución de Maxwell-Boltzmann con  $\mu = 0$ , encontraremos las siguientes dificultades:

la energía radiada por un número muy grande (infinito) de osciladores sería infinita y esto contradice el resultado experimental, ya que la densidad de energía es finita en el interior de la cavidad

y

la dependencia térmica de la energía sería errónea, ya que no podríamos explicar la dependencia establecida por la ley de Stefan-Boltzmann.

Repetiendo el argumento de Planck, *literalmente*, supondremos que la intensidad de la radiación, a la longitud de onda  $\lambda$ , se corresponde a la ley de distribución

$$I(\lambda, T)d\lambda = \frac{c_1}{\lambda^5 (e^{c_2/\lambda T} - 1)} d\lambda \quad (5.7.1)$$

donde  $c_1$  y  $c_2$  son constantes a determinar,  $\lambda$  es la longitud de onda de la radiación y  $T$  es la temperatura absoluta de la cavidad, en equilibrio con la radiación.

### 5.7.1 Ondas electromagnéticas en una cavidad

Una forma sencilla de entender la estructura de la expresión (5.7.1) consiste en contar explícitamente el número de configuraciones asociadas a ondas electromagnéticas en una cavidad.

Clásicamente, la expresión para el campo eléctrico dependiente del tiempo, en ausencia de superficies limitadoras, se escribe

$$E(r, t) = E_0 \epsilon e^{i(kr - \omega t)} \quad (5.7.2)$$

Esta expresión representa una onda plana, de amplitud  $E_0$  y vector de polarización  $\epsilon$ . En ausencia de cargas la divergencia del campo eléctrico se anula y por lo tanto existen dos estados de polarización para cada valor de  $k$ .

Si se considera que la onda está confinada en un cierto volumen la dependencia espacial cambia, respecto a la expresión anterior. Para ilustrar tal cambio, consideremos el problema en una dimensión, tal que la solución a la ecuación de onda

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} - \frac{d^2}{c^2 dt^2} \right) \varphi(x, t) = 0 \quad (5.7.3)$$

cumpla con condiciones de contorno periódicas, del tipo  $\varphi(x = 0, t) = \varphi(x = L, t) = 0$ . Escribiendo para la solución

$$\varphi(x, t) = A \sin(kx) e^{-i\omega t} \quad (5.7.4)$$

resulta la condición que fija los valores de  $k$ :

$$k = 2\pi n/L \quad (5.7.5)$$

donde  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \text{etc.}$  De modo que  $n = (L/2\pi)k$ .

Extendiendo el argumento a tres dimensiones espaciales y a partir de esta relación, el número de estados posibles  $dN(k)$  es igual al elemento de volumen  $(L/2\pi)^3 4\pi k^2 dk$  multiplicado por el número de estados de polarización.

Si ahora reemplazamos  $k$  por su valor en función de la frecuencia  $\omega$  ( $k = \omega/c$ ), el número de estados se escribe

$$\begin{aligned} dN(\omega) &= 2 \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 4\pi k^2 dk \\ &= \frac{V}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega \end{aligned} \quad (5.7.6)$$

Si multiplicamos esta expresión por la función de distribución

$$f(\omega) = \frac{1}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)} \quad (5.7.7)$$

y por el valor de la energía  $\hbar\omega$ , resulta la expresión de Planck para la distribución de intensidad

$$I(\omega, T) d\omega = \frac{V}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega^3}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)} d\omega \quad (5.7.8)$$

en función de  $\omega$ , o

$$I(\lambda, T) d\lambda = \frac{8\pi V ch}{\lambda^5} \frac{d\lambda}{(e^{\beta hc/\lambda} - 1)} \quad (5.7.9)$$

en función de la longitud de onda  $\lambda$ .

En las expresiones anteriores hemos usado  $\omega = 2\pi\nu$ , de modo que  $h\nu = \hbar\omega = hc/\lambda$  y a partir del reemplazo de la frecuencia por la longitud de onda en (5.7.8) recuperamos la forma propuesta por Planck, (5.7.9). Comparando este último resultado con (5.7.1), podemos fijar los valores de las constantes

$$\begin{aligned} c_1 &= 8\pi V ch \\ c_2 &= \frac{hc}{kT}. \end{aligned} \quad (5.7.10)$$

La estructura del denominador es consecuencia directa del postulado de discretización o cuantificación de la energía, como veremos más adelante. En consecuencia, para el valor de la energía media tenemos, al integrar sobre las frecuencias

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \int I(\omega, T) d\omega \\ &= \frac{V\pi^2 k_B^4}{15(\hbar c)^3} T^4 \end{aligned} \quad (5.7.11)$$

Este resultado expresa la energía por unidad de volumen en la cavidad  $\epsilon = \frac{E}{V}$  como una cantidad proporcional a  $T^4$ , resultado que está de acuerdo con la ley de Stefan-Boltzmann.

### 5.7.2 Sumas estadísticas

La forma propuesta por Planck para la distribución de intensidad,  $I(\lambda, T)$ , es una consecuencia directa del postulado (iii), referido a la *discretización* o *cuantificación* de la emisión y absorción de energía.

Podemos re-obtener la expresión de Planck para la distribución de intensidades a partir del uso de la distribución de Maxwell y a partir del concepto de discretización en el valor de la energía, como veremos a continuación.

Si los estados de energía permitidos varían según la expresión

$$E(\nu, n) = nh\nu \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.7.12)$$

la energía media se calcula, siguiendo las reglas de la teoría de distribuciones, sumando los factores exponenciales para cada energía permitida

$$\bar{E}_\nu = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-nh\nu\beta}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu\beta}} \quad (5.7.13)$$

como

$$\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-nh\nu\beta} = -\frac{\partial}{\partial\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu\beta} \quad (5.7.14)$$

y

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu\beta} = \frac{1}{1 - e^{-h\nu\beta}} \quad (5.7.15)$$

podemos reemplazar el resultado de la suma (5.7.15) en la derivada respecto a  $\beta$  (5.7.14) y escribir el valor de esta operación en la expresión de la energía media, obteniendo

$$\bar{E}_\nu = \frac{h\nu}{e^{h\nu\beta} - 1} \quad (5.7.16)$$

El paso siguiente consiste en multiplicar el valor de la energía promedio para cada oscilador de frecuencia  $\nu$ ,  $\bar{E}_\nu$ , dado por (5.7.16), por el valor del número de osciladores  $dN(\nu)$  en el intervalo de frecuencias  $\nu, \nu + d\nu$  e integrar sobre todas las frecuencias

$$\bar{E} = \int \frac{dN(\nu)h\nu}{e^{h\nu\beta} - 1} \quad (5.7.17)$$

y esta es precisamente la integración que permitió establecer la correcta relación (5.7.11) entre la energía media y la temperatura absoluta de la cavidad.

Hoy sabemos que el resultado de Planck es perfectamente compatible con los postulados de la Mecánica Estadística Cuántica y que la ley de distribución de Planck es un caso especial de las leyes de distribución cuánticas, ya que toma la forma de la distribución de Bose-Einstein para bosones cuya masa en reposo nula (tal el caso de los fotones). Más adelante retornaremos a la discusión de este problema, al estudiar las estadísticas cuánticas.

El otro resultado importante está referido a la ley del corrimiento espectral. En efecto, si tomamos la distribución de intensidad como función de la longitud de onda, de acuerdo a la ley de distribución de Planck

$$I(\lambda, T)d\lambda \approx \frac{1}{\lambda^5(e^{\beta hc/\lambda} - 1)}d\lambda \quad (5.7.18)$$

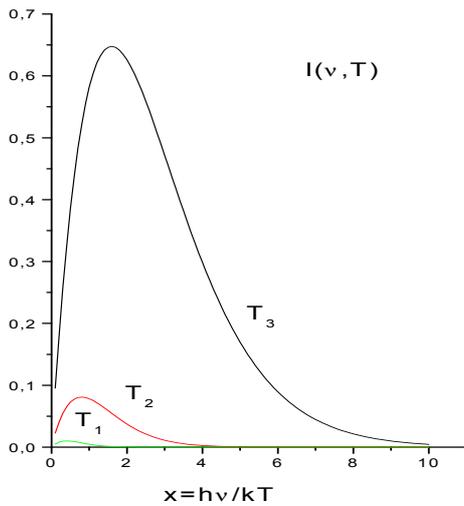


Figura 5.5: Corrimiento espectral. Las curvas muestran el comportamiento de la distribución de frecuencias para diferentes temperaturas absolutas.

y derivamos con respecto a la longitud de onda, la condición de extremo establece

$$5(e^x - 1) - e^x x = 0 \quad (5.7.19)$$

donde  $x = hc/(\lambda kT)$  y cuya solución  $x \approx 4.96$  fija el valor  $\lambda T \approx 2.898 \cdot 10^{-3} \text{ } ^\circ K m$ , para la localización del máximo. Por lo tanto,

$$\lambda T = \text{constante} \quad (5.7.20)$$

como lo establece la ley de Wien para el corrimiento espectral. La Figura 5.5 muestra los máximos correspondientes a diferentes temperaturas.

## 5.8 Resumen del capítulo

- *Efecto Fotoeléctrico.*
- *Efecto Compton.*
- *Distribuciones clásicas.*
- *Radiación del cuerpo negro.*

## 5.9 Problemas

1. La energía necesaria para extraer un electrón del sodio es  $2.3 \text{ eV}$ .
  - a) determinar si el sodio presentará efecto fotoeléctrico para la luz amarilla de  $5890 \text{ \AA}$ .
  - b) ¿cuál es la longitud de onda de corte para la emisión fotoeléctrica en el sodio?

2. El potencial de frenado para fotoelectrones emitidos por una superficie iluminada por luz de longitud de onda  $\lambda = 4910 \text{ \AA}$  es de  $0.71 \text{ eV}$ , cuando se cambia la longitud de onda incidente se encuentra que el potencial de frenado es  $1.43 \text{ eV}$ . ¿Cuál es la nueva longitud de onda?
3. Calcule y grafique la dependencia angular del corrimiento Compton causado por un protón.
4. A partir de la distribución de probabilidades de Maxwell-Boltzman calcule el valor medio, la desviación cuadrática media y el valor más probable para la de la energía. Grafique.
5. Calcule los valores de  $I(\lambda, T)$ , (5.7.9), para radiación infrarroja y ultravioleta.
6. En una explosión termonuclear la temperatura es del orden de  $10^7 \text{ } ^\circ\text{K}$ . Encuentre la longitud de onda para la cual la radiación emitida es máxima.
7. A una temperatura dada la longitud de onda máxima de un cuerpo negro es  $\lambda_{max} = 6500 \text{ \AA}$ . ¿Cuál será  $\lambda_{max}$  si la temperatura de las paredes de la cavidad aumenta de modo que la razón de emisión espectral se duplica?
8. Demuestre que la ley de Rayleigh-Jeans

$$f(\nu)d\nu = \frac{8\pi \nu^2 kT}{c^2}d\nu, \quad (5.9.1)$$

no es consistente con la Ley de desplazamiento de Wien. Idem para

$$f(\nu)d\nu = e^{-h\nu/kT}d\nu. \quad (5.9.2)$$

## Capítulo 6

# MODELO ATÓMICO DE BOHR

### 6.1 Introducción

Durante la última parte del siglo XIX se acumularon suficientes evidencias experimentales que sugerían la existencia de constituyentes elementales (átomos) de la materia. El descubrimiento del electrón constituyó una evidencia directa en favor de una teoría microscópica. También se determinó que los electrones están presentes como constituyentes de los átomos y que la radiación espectral es el resultado del movimiento de los electrones. Al mismo tiempo, como los electrones poseen carga negativa, la neutralidad eléctrica de la materia indicó la existencia de cargas positivas en los átomos. La medición de la relación carga/masa para los electrones reveló que la mayor parte de la masa de un átomo debería estar relacionada con las cargas positivas. De acuerdo con esta descripción y considerando el movimiento simple de electrones y núcleos masivos de carga positiva y atendiendo al electromagnetismo clásico, los electrones deberían estar acelerados por la presencia de los núcleos, la materia debería colapsar y los átomos deberían radiar energía de manera proporcional al cuadrado de la aceleración. Como esto no ocurre, se concluyó que los átomos deberían estar en algún tipo de estado estacionario desde donde no podrían emitir radiación.

El modelo atómico de Thomson consiste en una distribución uniforme de carga positiva permeable a las cargas negativas, con electrones que pueden estar fijos o moviéndose armónicamente alrededor de ciertas posiciones de equilibrio. El movimiento armónico de los electrones alrededor de estas posiciones de equilibrio es, en el modelo de Thomson, responsable de la emisión de radiación.

En 1910 E. Rutherford realizó experimentos de dispersión de partículas  $\alpha$ , provenientes del decaimiento de átomos radiactivos, a través de láminas metálicas delgadas. Rutherford comprobó, en contra de lo esperado suponiendo la validez del modelo de Thomson, según el cual para una distribución uniforme de cargas positivas y negativas la mayor parte de las partículas  $\alpha$ , cuya carga eléctrica es positiva, deberían detectarse en las direcciones de bombardeo, que un número muy grande de las partículas eran dispersadas en trayectorias muy apartadas de las trayectorias originales. La existencia de estas dispersiones a ángulos elevados probó que la distribución de cargas positivas en la materia debería estar concentrada espacialmente y no distribuída en forma uniforme como lo postulaba el modelo de Thomson.

Al mismo tiempo, considerando el valor de los ángulos de dispersión, se concluyó que el tamaño del centro dispersor debería ser del orden de  $4 \times 10^{-10}$  metros o menor.

Los resultados experimentales eran consistentes con la expresión (formula de Rutherford)

$$\frac{dN}{d\Omega} = \frac{N_0 n t Z_1^2 Z_2^2 e^4}{64\pi^2 \epsilon_0^2 m_1^2 v_0^2 \sin^4 \theta/2} \quad (6.1.1)$$

donde  $\frac{dN}{d\Omega}$  es el número de partículas  $\alpha$  dispersadas por unidad de ángulo sólido en la dirección  $\theta$  respecto a la dirección de incidencia;  $N_0$  es el número de partículas incidentes;  $n$  es el número de centros dispersores por unidad de volumen del blanco (lámina de metal),  $t$  es el espesor del blanco,  $Z_1 = 2$  es el número atómico de las partículas incidentes (partículas  $\alpha$ ),  $Z_2$  es el número atómico del material que forma el blanco,  $v_0$  es la velocidad de las partículas incidentes y  $m_1$  es la masa de las partículas incidentes.

La dependencia de esta distribución con respecto al espesor del material, la energía cinética de las partículas incidentes y el ángulo de dispersión, fue verificada experimentalmente en una serie de cuidadosos experimentos llevados a cabo por Geiger y Marsden.

Estos resultados experimentales fueron el detonante de un serio conflicto en física, entre teoría y experimentos. Por un lado, la emisión de radiación, por parte de los átomos, exigía una cierta dinámica; por otra parte, la estabilidad atómica y la ausencia de colapso por atracción electrostática exigía una cierta estacionaridad.

El conflicto fue resuelto por Niels Bohr, quien en 1913 presentó su teoría del átomo de hidrógeno.

## 6.2 Postulados de Bohr

- El átomo de hidrógeno esta compuesto por una núcleo de carga positiva (protón) y por una partícula más liviana, de carga negativa (electrón), en un estado de movimiento relativo producido por su interacción coulombiana.
- El átomo puede permanecer por periodos extensos de tiempo en un dado estado, sin emitir ondas electromagnéticas, si dicho estado es uno para el que el momento angular,  $L$ , del átomo es un múltiplo entero de la cantidad  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ; de modo que  $L = n\hbar$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) .
- La radiación es emitida si el átomo "salta" de un estado "permitido" de energía  $E_i$  a otro estado "permitido" de energía  $E_f$ .
- Cuando el átomo emite radiación, la frecuencia correspondiente está determinada por la condición

$$h\nu = E_i - E_f \quad (6.2.1)$$

Estos postulados permiten interpretar los resultados de los experimentos de Rutherford y al mismo tiempo destacan la inaplicabilidad del electromagnetismo clásico en procesos atómicos. La teoría clásica, en consecuencia, es reemplazada por reglas que introducen la constante de Planck: a) afirmando que el momento angular del átomo debe ser un múltiplo

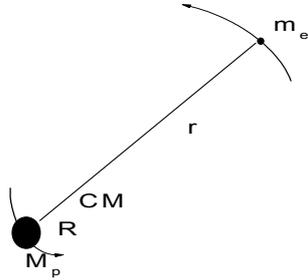


Figura 6.1: Esquema simple del átomo de hidrógeno: el protón, cuya masa es  $M$ , y el electrón, de masa  $m$ , se mueven en torno al centro de masa  $CM$  del sistema.

entero de  $\hbar$  y b) afirmando que la frecuencia de la radiación emitida debe corresponder, en unidades de  $1/h$ , a la diferencia de energía entre los estados involucrados en la emisión.

Para determinar la energía de los estados permitidos del átomo de hidrógeno utilizaremos un procedimiento ad-hoc. La demostración rigurosa será presentada cuando estudiemos el problema del movimiento de una partícula cargada en un campo coulombiano, siguiendo las reglas de la mecánica cuántica (ver Capítulo 10).

La situación que deseamos describir se ilustra en la Figura 6.1. El protón, de masa  $M$  y carga  $e$ , ejecuta un movimiento circular alrededor del centro de masa ( $CM$ ) del sistema.  $R$  es el radio de la órbita del protón y  $\omega$  es su velocidad angular; el electrón, cuya masa es  $m$ , posee carga  $-e$  y se mueve circularmente alrededor del  $CM$  en una órbita de radio  $r$ , con la misma velocidad angular  $\omega$ .

La aplicación de los postulados de Bohr a este sistema determina:

- Momento angular del sistema

Considerando al  $CM$  en reposo, resulta

$$mr = MR \quad \rightarrow \quad R = \frac{m}{M}r \quad (6.2.2)$$

El módulo del momento angular total del sistema,  $L$ , es igual a la suma de los momentos angulares del protón y del electrón y posee el valor

$$\begin{aligned} L &= mr^2\omega + MR^2\omega \\ &= mr^2\omega \left(1 + \frac{m}{M}\right) \end{aligned} \quad (6.2.3)$$

- Movimiento relativo

La fuerza de Coulomb entre cargas es la fuerza que produce la aceleración centrípeta y por lo tanto

$$\begin{aligned} m\omega^2 r &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r+R)^2} \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2 \left(1 + \frac{m}{M}\right)^2} \end{aligned} \quad (6.2.4)$$

(ya que hemos supuesto que la distancia entre cargas es constante)

- Energía total del sistema

La energía total del sistema es igual a la suma de las energías cinéticas del protón y del electrón y la energía coulombiana entre cargas

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}mr^2\omega^2 + \frac{1}{2}MR^2\omega^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r \left(1 + \frac{m}{M}\right)} \\ &= \frac{1}{2}mr^2\omega^2 \left(1 + \frac{m}{M}\right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r \left(1 + \frac{m}{M}\right)} \end{aligned} \quad (6.2.5)$$

A partir de la expresión (6.2.3) podemos escribir el valor del término coulombiano de la energía, (6.2.5), en función de la frecuencia angular y del radio de la órbita del electrón

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r \left(1 + \frac{m}{M}\right)} = m\omega^2 r^2 \left(1 + \frac{m}{M}\right) \quad (6.2.6)$$

de donde, reemplazando en la expresión para  $E$ , (6.2.5), se obtiene

$$E = -\frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \left(1 + \frac{m}{M}\right) \quad (6.2.7)$$

Resumiendo estos resultados

$$\begin{aligned} mr^2\omega \left(1 + \frac{m}{M}\right) &= n\hbar \\ E &= -\frac{1}{2}mr^2\omega^2 \left(1 + \frac{m}{M}\right) \\ m\omega^2 r &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2 \left(1 + \frac{m}{M}\right)^2} \end{aligned} \quad (6.2.8)$$

A los efectos de obtener la solución podemos escribir:

$$\begin{aligned} \omega r^2 &= \frac{n\hbar}{\mu} \\ \omega^2 r^2 &= -\frac{2E}{\mu} \\ \omega^2 r^3 &= \frac{e^2 m}{4\pi\epsilon_0 \mu^2} \end{aligned} \quad (6.2.9)$$

donde

$$\mu = m \left(1 + \frac{m}{M}\right) \quad (6.2.10)$$

Tomando el cociente de las primeras dos ecuaciones en (6.2.9) podemos determinar el valor del radio

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}n^2 \quad (6.2.11)$$

Este es el primer resultado importante del modelo ya que establece que el movimiento orbital es permitido solo para ciertos valores del radio. Estos valores se expresan en unidades del *radio de Bohr*

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 5.29 \times 10^{-11} \text{ metros} \quad (6.2.12)$$

Así

$$r \equiv r_n = a_0 n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (6.2.13)$$

Con este valor del radio, podemos expresar la energía (6.2.7) de la manera siguiente

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{e^2 m}{8\pi\epsilon_0 \mu r_n} \\ &= -\left( \frac{e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \left(1 + \frac{m}{M}\right)} \right) \frac{1}{n^2} \end{aligned} \quad (6.2.14)$$

Para una transición entre estados caracterizados por los números enteros  $n$  y  $n'$ , cuyas energías son  $E_n$  y  $E_{n'}$ , y aplicando la regla de Einstein-Bohr que relaciona la frecuencia de la radiación emitida con la diferencia de la energía entre estados, se obtiene

$$\begin{aligned} h\nu &= E_n - E_{n'} \\ &= \left( \frac{e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \left(1 + \frac{m}{M}\right)} \right) \left[ \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right] \end{aligned} \quad (6.2.15)$$

La energía de ionización del átomo de hidrógeno, que es la energía necesaria para extraer un electrón del primer estado ( $n=1$ ), se calcula a partir de la diferencia

$$\begin{aligned} E_{\text{ion.}} &= E_{n=\infty} - E_{n=1} \\ &= \left( \frac{e^4 m}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \left(1 + \frac{m}{M}\right)} \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \end{aligned} \quad (6.2.16)$$

Con los valores que se indican en la tabla 6.3 se obtiene para la energía de ionización el resultado  $E_{\text{ion.}} \approx 13.58$  eV, valor que reproduce muy satisfactoriamente el valor experimental que es del orden de 13.60 eV.

### 6.3 Series espectrales

Los resultados obtenidos en la sección anterior pueden ser comparados, directamente, con los resultados experimentales. En efecto, el análisis experimental del espectro visible del

átomo de hidrógeno mostró la existencia de regularidades (series) en el espectro. Las longitudes de onda pertenecientes a una dada secuencia (serie) fueron clasificadas de acuerdo a la expresión empírica

$$\lambda_n = \frac{b(n_0)n^2}{n^2 - n_0^2} \quad (6.3.1)$$

(series de Lyman ( $n_0 = 1$ ), Balmer ( $n_0 = 2$ ), Paschen ( $n_0 = 3$ )). Podemos demostrar, tal como lo demostró Bohr, que la clasificación experimental de las series del espectro del átomo de hidrógeno se corresponde directamente a la expresión teórica obtenida para la frecuencia  $\nu$ :

$$\nu = cR_H^{\text{teor}} \left[ \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right] \quad (6.3.2)$$

La cantidad

$$R_H^{\text{teor}} = \left( \frac{e^4 m}{8c\epsilon_0^2 h^3 \left(1 + \frac{m}{M}\right)} \right) \approx 1.097 \cdot 10^7 \text{ (metros)}^{-1} \quad (6.3.3)$$

es una cantidad que depende solamente de constantes físicas fundamentales:  $e$  (carga del electrón),  $h$  (constante de Planck),  $c$  (velocidad de la luz en el vacío),  $\epsilon_0$  ( permitividad eléctrica del vacío),  $m$  (masa en reposo del electrón) y  $M$  (masa en reposo del protón) (ver Tabla siguiente).

Magnitud	Simbolo	Valor (MKS)
velocidad de la luz	$c$	$2.99793 \cdot 10^8 \text{ m-seg}^{-1}$
carga del electrón	$e$	$1.60206 \cdot 10^{-19} \text{ Coul}$
masa en reposo del electrón	$m_e$	$9.1083 \cdot 10^{-31} \text{ kgr}$
	$m_e c^2$	$0.511 \text{ MeV}$
masa en reposo del protón	$M_p$	$1.67239 \cdot 10^{-27} \text{ kgr}$
	$M_p c^2$	$938.573 \text{ MeV}$
constante de Planck	$h$	$6.62517 \cdot 10^{-34} \text{ Joule-seg.}$
constante de Planck reducida	$\hbar$	$1.05443 \cdot 10^{-34} \text{ Joule-seg.}$
	$\hbar c$	$3.158 \cdot 10^{-26} \text{ Joule-m}$
permitividad eléctrica del vacío	$\epsilon_0$	$8.85434 \cdot 10^{-12} \text{ Coul}^2/(\text{Joule-m}).$
radio de Bohr	$a_0$	$5.29172 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
longitud de onda Compton del electrón	$\lambda_{ce}$	$2.42626 \cdot 10^{-12} \text{ m}$
longitud de onda Compton del protón	$\lambda_{cp}$	$1.32141 \cdot 10^{-15} \text{ m}$

La conversión de estos valores a unidades de Fermi (F) y electron-Volt (eV) se realiza a partir de las equivalencias:  $1F = 10^{-15} \text{ m}$ ,  $1 \text{ eV} = 1.60210 \cdot 10^{-19} \text{ Joule}$ , de donde  $\hbar c = 197.128 \text{ MeV F}$ ,  $a_0 = 5.291 \cdot 10^4 \text{ F}$ , etc.

Si definimos la frecuencia reducida

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} \quad (6.3.4)$$

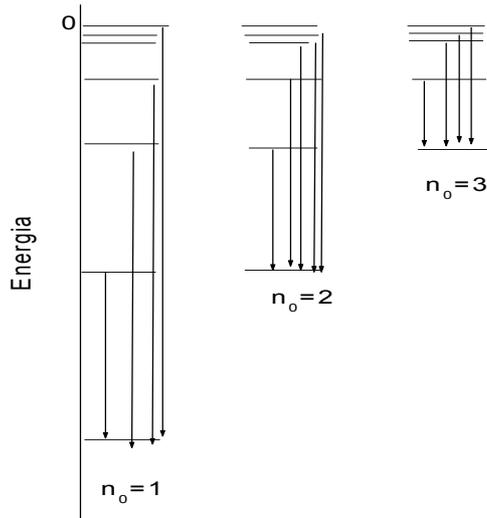


Figura 6.2: Secuencia de estados y transiciones en el átomo de hidrógeno, de acuerdo al modelo de Bohr.

donde  $\lambda$  es la longitud de onda de la radiación, la expresión obtenida para la frecuencia correspondiente a la radiación emitida por el átomo al cambiar su estado desde el estado definido por el número entero  $n$  al estado definido por  $n'$  se escribe

$$\frac{1}{\lambda} = R_H^{\text{teor}} \left[ \frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right] \quad (6.3.5)$$

y en consecuencia

$$\lambda_{n \rightarrow n'} = \frac{1}{R_H^{\text{teor}}} \left[ \frac{n^2 n'^2}{n^2 - n'^2} \right]. \quad (6.3.6)$$

En este punto podemos comparar este resultado con el correspondiente a la parametrización experimental, si establecemos la siguiente asignación de valores para  $n_0$ :

$$\begin{aligned} n' = n_0 = 1 & \quad b(1) = \frac{1}{R_H^{\text{exp}}} \quad (\text{Lyman}) \\ n' = n_0 = 2 & \quad b(2) = \frac{4}{R_H^{\text{exp}}} \quad (\text{Balmer}) \\ n' = n_0 = 3 & \quad b(3) = \frac{9}{R_H^{\text{exp}}} \quad (\text{Paschen}) \end{aligned} \quad (6.3.7)$$

La Figura 6.2 muestra la secuencia de transiciones para las series de Lyman, Balmer y Paschen. El valor experimental  $R_H^{\text{exp}}$ , determinado a partir de  $b(2)$ , es la llamada constante de Rydberg y su valor es  $1.09737318(8) \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ . El valor teórico  $R_H^{\text{teor}}$ , (6.3.3), calculado en el modelo de Bohr, reproduce satisfactoriamente el valor experimental. Este es uno de los resultados más impresionantes del modelo de Bohr, que no solo da una interpretación cualitativamente correcta de la serie espectral, sino que también reproduce cuantitativamente los factores experimentales.

El modelo de Bohr se aplicó, con algunas pequeñas modificaciones, para calcular el espectro de átomos simplemente ionizados (átomos hidrogenoides), considerando la carga del núcleo  $Ze$  y su masa  $M_N$ , resulta,

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{mZ^2e^4}{8\pi^2\epsilon_0^2h^3 \left(1 + \frac{m}{M_N}\right)} \left[ \frac{n^2n'^2}{n^2 - n'^2} \right] \quad (6.3.8)$$

Los postulados de Bohr y el éxito de los mismos en la explicación del espectro de los átomos hidrogenoides constituyeron una evidencia muy fuerte en favor de una nueva (por entonces, 1913) forma de pensar la física de los procesos a escala atómica. La incorporación de esos postulados en el cuerpo de una teoría y su generalización llevó más de veinte años y el resultado fue la formulación de la Mecánica Cuántica. A partir de los postulados de Bohr, resulta evidente que la teoría cuántica difiere drásticamente de la clásica, ya que estos postulados establecen

- La discretización de los valores de cantidades clásicas, como la energía y el momento angular, abandonando por lo tanto la noción de continuidad en la representación de estos valores.
- La introducción del concepto de *estado estacionario*.

La solución de Bohr para el átomo de hidrógeno posee un significado muy amplio y diametralmente opuesto a la concepción clásica. Como veremos en el capítulo siguiente, las definiciones clásicas de posición y momento no son aplicables a escala atómica. Tampoco son aplicables las reglas newtonianas relacionadas con el cálculo de trayectorias. Estas definiciones deben ser reemplazadas por un conjunto de reglas que constituyen el cuerpo de la Mecánica Cuántica. El modelo que hemos presentado puede considerarse un antecesor de la teoría cuántica. En la Mecánica Cuántica:

- Las asignaciones clásicas de coordenadas y momentos se reemplazan por el resultado de la aplicación de operadores sobre estados cuánticos.
- Se elimina la noción de trayectoria y se introducen valores medios de operadores como representación de los observables físicos.

Las preguntas que podemos formular son casi obvias:

- ¿cómo se calculan los estados estacionarios de un dado sistema cuántico?*
- ¿cuáles son los operadores correspondientes y cuáles las reglas que se deben respetar para la determinación de observables físicos?*
- ¿cómo se establecen las relaciones entre teoría y datos experimentales?*

Las respuestas son menos obvias y requieren de un tratamiento detallado. En este libro nos limitaremos a estudiar ejemplos muy específicos de aplicación de los conceptos cuánticos.

Respecto al punto (a) tomaremos el caso del oscilador armónico y estudiaremos la estructura de las soluciones en el marco de la ecuación de Schrödinger, que es una herramienta adecuada para interpretar las consecuencias de los postulados cuánticos pero que no es en sí misma la Mecánica Cuántica. Respecto al punto (b) resolveremos el caso

del oscilador armónico y construiremos una representación para ilustrar el papel de los operadores correspondientes a la posición y al momento y al momento. Como ejemplo de (c) estudiaremos el problema de la propagación en presencia de barreras y resolveremos el potencial coulombiano entre cargas puntuales. Finalmente, a partir de las conclusiones a las que lleguemos en el estudio de cada ejemplo, formularemos los postulados básicos de la Mecánica Cuántica e introduciremos los elementos básicos de la teoría.

## 6.4 Resumen del capítulo.

- *Experimento de Rutherford.*
- *Modelo atómico de Bohr.*
- *Interpretación de resultados y conflictos con la Mecánica Clásica.*

## 6.5 Problemas

1. Un haz de partículas de  $\alpha$  de energía cinética 5.30 MeV e intensidad  $10^4$  partículas/seg inciden normalmente sobre una lamina de oro de densidad  $19.3 \text{ g/cm}^3$ ,  $A=197$  y espesor  $1.0 \cdot 10^{-5} \text{ cm}$ . A una distancia de  $10 \text{ cm}$  se coloca un detector de partículas  $\alpha$  de área  $1.0 \text{ cm}^2$ . Utilizando la sección transversal diferencial de dispersión de Rutherford, encontrar el número de conteos por hora para  $\theta = 10^\circ$  y  $\theta = 45^\circ$ , donde  $\theta$  es el ángulo entre el haz incidente y el detector. El valor de  $Z$  en el oro (Au) es 79.
2. Demostrar que la frecuencia de revolución para un electrón en el átomo de Bohr está dado por  $\nu = 2 |E| / hn$ , donde  $E$  es la energía total del electrón.
3. Cuánto valen la energía, el impulso y la longitud de onda de un fotón emitido por un átomo de hidrógeno que sufre una transición directa desde un estado excitado con  $n = 10$  al estado fundamental.
4. Calcular, utilizando la fórmula de Bohr, las tres longitudes de onda más largas en la serie de Balmer. Calcular las longitudes de onda más cortas de la serie de Lyman y Paschen.

## Capítulo 7

# POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

### 7.1 Introducción

En este capítulo comenzaremos la discusión de los postulados básicos de la Mecánica Cuántica, que es la formulación adecuada para la descripción de fenómenos físicos a escala atómica y sub-atómica. En capítulos anteriores hemos analizado ejemplos muy concretos de inaplicabilidad de leyes clásicas a escala atómica, en particular:

i) Radiación del cuerpo negro (Planck) y efecto fotoeléctrico (Einstein): en ambos casos se postula, exitosamente, la cuantificación de la energía transportada por la luz y la forma en que la misma es absorbida o emitida.

ii) Espectros atómicos: los átomos poseen niveles de energía discretos, de manera que la información relacionada con los espectros atómicos puede explicarse en función de transiciones entre estados de energía separados por cantidades elementales .

iii) Cuantificación del momento angular: el momento angular toma valores discretos, en unidades de  $\hbar$ , la constante de Planck

iv) Decaimiento radiactivo de los átomos: la emisión de partículas ocurre en condiciones prohibidas clásicamente.

A manera de introducción a la Mecánica Cuántica presentaremos los postulados básicos de la teoría. En los capítulos siguientes nos dedicaremos a estudiar las aplicaciones más simples de dichos postulados.

#### **Postulado 1: Vectores de estado y sus propiedades**

La información referida a un sistema físico, en el contexto de la mecánica cuántica, está contenida en su *vector de estado*  $\Psi$ . Las propiedades básicas de estos vectores de estado son las siguientes:

a) Linealidad: la suma de dos o más vectores de estado es otro vector de estado

$$\Psi + \Phi = \Theta \tag{7.1.1}$$

b) Multiplicación por escalares: la multiplicación de un escalar por un vector de estado tiene como resultado otro vector de estado

$$z\Psi = \Phi \quad (7.1.2)$$

donde  $z$  es un escalar (en general la palabra *escalar* la usaremos para designar a un número, sea este real o complejo).

c) Producto escalar:

El *producto escalar* de dos vectores de estado

$$(\Psi, \Phi) \quad (7.1.3)$$

es igual a un escalar. En particular, el producto escalar

$$(\Psi, \Psi) = \|\Psi\|^2 \quad (7.1.4)$$

define el cuadrado de la *norma* del vector de estado.

d) Base de vectores de estado: un conjunto de vectores de estado  $\Psi_n$  forma una *base* si mediante combinaciones lineales de la forma

$$\Phi = \sum_n c_n \Psi_n \quad (7.1.5)$$

puede expresarse cualquier otro vector de estado, tal que

$$\begin{aligned} \|\Psi\|^2 &= (\Psi, \Psi) = \sum_{n,m} c_m^* c_n (\Psi_n, \Psi_m) \\ &= \sum_n |c_n|^2 \end{aligned} \quad (7.1.6)$$

Los coeficientes  $c_n$  son escalares y los vectores de la base satisfacen la condición de normalización:

$$(\Psi_n, \Psi_m) = \delta_{n,m} \quad (7.1.7)$$

de manera que

*El producto escalar de dos vectores de la base es igual a 1 si los índices de ambos vectores son iguales y 0 si son distintos.*

### Postulado 2: Operadores y sus propiedades

La acción de entes que designaremos mediante el término *operadores* al actuar sobre vectores de estado produce vectores de estado

$$\hat{O}\Psi = \Phi \quad (7.1.8)$$

La aplicación de distintos operadores sobre un vector de estado no es, en general, conmutativa. Si suponemos que dos operadores  $\hat{P}$  y  $\hat{O}$  se aplican sobre vectores de estado  $\Phi, \Sigma, \Delta, \Psi$  según

$$\begin{aligned} \hat{O}\Psi &= \Phi \quad , \quad \hat{P}\Phi = \Sigma \\ \hat{P}\Psi &= \Delta \quad , \quad \hat{O}\Delta = \Gamma \end{aligned} \quad (7.1.9)$$

entonces

$$\begin{aligned}\hat{P}(\hat{O}\Psi) &= \hat{P}\Phi = \Sigma \\ \hat{O}(\hat{P}\Psi) &= \hat{O}\Delta = \Gamma\end{aligned}\quad (7.1.10)$$

y restando ambas igualdades resulta

$$(\hat{P}\hat{O} - \hat{O}\hat{P})\Psi = \Sigma - \Gamma \quad (7.1.11)$$

que no se anula a menos que los vectores de estado  $\Sigma$  y  $\Gamma$  coincidan. La operación

$$(\hat{P}\hat{O} - \hat{O}\hat{P}) = [\hat{P}, \hat{O}] \quad (7.1.12)$$

define el *conmutador* de los operadores  $\hat{P}$  y  $\hat{O}$ , de modo que solamente cuando ambos operadores conmutan

$$[\hat{P}, \hat{O}] = 0 \quad (7.1.13)$$

su aplicación sobre un vector de estado no dependerá del orden en el que se efectúe la misma.

Si la aplicación de un operador sobre un dado vector de estado produce, a menos de un escalar, el mismo vector de estado

$$\hat{Q}\Psi = q\Psi \quad (7.1.14)$$

diremos que  $\Psi$  es un vector propio o *autovector* del operador  $\hat{Q}$  con *autovalor*  $q$ . El conjunto de valores propios de un dado operador puede tener infinitos elementos. En lo sucesivo nos referiremos a este conjunto como a un conjunto numerable y por lo tanto la misma observación vale respecto a las dimensiones de las bases que utilizaremos para expandir la función de onda de un sistema. En general utilizaremos operadores que poseen más de un vector propio y designaremos a cada vector perteneciente al conjunto de vectores propios de cada operador mediante un sub-índice

$$\hat{Q}\Psi_n = q_n\Psi_n \quad (7.1.15)$$

donde  $q_n$  es el autovalor correspondiente al autovector  $\Psi_n$ . Si los autovalores  $q_n$  son *reales* el operador  $\hat{Q}$  es *hermítico* y escribiremos, para indicar esta propiedad

$$\hat{Q}^\dagger = \hat{Q} \quad (7.1.16)$$

La construcción que incluye a los vectores de estado, a los operadores y a las operaciones entre vectores de estado y entre operadores es denominada, en general, *espacio de Hilbert*. La discusión de las propiedades formales del espacio de Hilbert exceden esta presentación y en lo que sigue nos limitaremos a utilizar tales propiedades en forma operacional.

Mostraremos ahora que *si dos operadores conmutan entonces existe un conjunto de autovectores y autovalores comunes a ambos operadores y viceversa*. Si tomamos dos operadores,  $P$  y  $Q$ , tales que

$$\hat{Q}\Psi_n = q_n\Psi_n \quad (7.1.17)$$

y

$$\hat{P}\Psi_n = p_n\Psi_n \quad (7.1.18)$$

entonces

$$\begin{aligned}\hat{Q}\hat{P}\Psi_n &= p_n\hat{Q}\Psi_n = p_nq_n\Psi_n \\ \hat{P}\hat{Q}\Psi_n &= q_n\hat{P}\Psi_n = q_np_n\Psi_n\end{aligned}\quad (7.1.19)$$

y por lo tanto

$$[\hat{P}, \hat{Q}]\Psi_n = (p_nq_n - q_np_n)\Psi_n = 0 \quad (7.1.20)$$

ya que  $p_n$  y  $q_n$  son escalares.

### Postulado 3: Observables

El proceso de medición de una cantidad física se corresponde, en el contexto de la Mecánica Cuántica, a la determinación de los valores propios de un operador hermítico. Si el sistema físico sobre el que efectuamos la medida está representado por el vector de estado  $\Psi$ , expresado en la base de autovectores  $\Phi_n$  del operador  $\hat{Q}$ , que es el operador asociado a la magnitud física cuya medida deseamos efectuar, la aplicación del operador sobre el vector de estado produce el vector de estado

$$\hat{Q}\Psi = \sum_n c_n \hat{Q}\Phi_n = \sum_n c_n q_n \Phi_n \quad (7.1.21)$$

y el producto escalar de este vector de estado con  $\Psi$  resulta

$$(\Psi, \hat{Q}\Psi) = \sum_{n,m} c_m^* c_n q_n (\Phi_m, \Phi_n) = \sum_n |c_n|^2 q_n \quad (7.1.22)$$

de modo que el resultado esperado de la medición será el valor  $(\Psi, \hat{Q}\Psi)$ . La expresión de este valor esperado indica que el mismo es igual a la suma de los valores propios  $q_n$  pesados por el módulo de los factores  $c_n$ . En la interpretación probabilística de la Mecánica Cuántica los factores  $|c_n|^2$  representan la probabilidad de encontrar al sistema en el estado propio  $\Phi_n$ .

## 7.2 Estado de un sistema: representaciones

En esta sección discutiremos el significado de una representación de los vectores de estado a partir de la ecuación de Schrödinger, cuya solución discutiremos, para algunos casos especiales, en los capítulos siguientes. El concepto de *función de onda* no es equivalente al de vector o función de estado. Para determinar la función de onda de un sistema debemos fijar *una representación*, es decir pasar del esquema de operadores, vectores de estado y bases en el espacio de Hilbert a un esquema donde, siguiendo ciertas reglas de correspondencia, a los operadores se le asignan formas diferenciales, a los vectores de estado se le asignan formas funcionales, las llamadas *funciones de onda*, y la aplicación de operadores a los vectores de estado es reemplazada por operaciones diferenciales efectuadas sobre funciones.

El estado de un sistema cuántico (i.e: una partícula, un átomo, un núcleo, una molécula, etc) se representa mediante su *función de onda*. Si el sistema está compuesto por una sola partícula, su función de onda es una función de las coordenadas de la partícula en un dado tiempo  $t$  (ignoraremos, por el momento, contribuciones relacionadas, por ejemplo,

con el momento angular intrínseco (spin) de la partícula).

Si  $\phi(r, t)$  es la función de onda de una partícula, su evolución temporal está determinada por la *ecuación de Schrödinger* dependiente del tiempo

$$\hat{H}\phi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \phi(r, t)}{\partial t} \quad (7.2.1)$$

En esta expresión,  $\hat{H}$  es un *operador diferencial*, llamado Hamiltoniano y sus valores propios poseen el significado de la energía. La probabilidad de encontrar a la partícula en el volumen elemental  $d^3r$ , alrededor de  $r$ , en el tiempo  $t$  se define

$$P(r, t)d^3r = |\phi(r, t)|^2 d^3r \quad (7.2.2)$$

Por el momento supondremos que esta probabilidad está normalizada, de manera que

$$\int P(r, t)d^3r = \int |\phi(r, t)|^2 d^3r = 1 \quad (7.2.3)$$

La integración se extiende sobre todo el espacio y si la partícula está confinada en un volumen  $V$ , el recinto de integración se limita a este volumen. No todas las funciones de onda pueden normalizarse de esta manera. Si pensamos en la función (ondas planas)

$$\phi(r, t) = e^{i(k \cdot r - \omega t)} \quad (7.2.4)$$

su módulo es igual a 1 y la integral sobre todo el espacio es infinita. Por el momento consideraremos solamente funciones de onda normalizables. En consecuencia, la ecuación que define la probabilidad (7.2.2) ilustra las propiedades básicas de la Mecánica Cuántica:

i) la posición de la partícula, en un dado tiempo  $t$ , no está determinada en forma unívoca, solamente está definida la probabilidad de encontrar a la partícula en un estado dado, representado por la función de onda  $\phi(r, t)$ .

ii) la densidad de probabilidad  $P(r, t)$ , que es un observable, está relacionada con la función de onda  $\phi(r, t)$ , que no es un observable.

### 7.3 Operadores y observables: representaciones

Cantidades tales como la posición, el momento y la energía de una partícula son denominadas *observables*. En física clásica, los observables son representados mediante variables ordinarias. En Mecánica Cuántica los *observables* se representan mediante *operadores*, que actúan sobre funciones de onda. No es posible obtener, a partir de la mecánica clásica, operadores que representen observables. Este es un concepto puramente cuántico y como tal lo aplicaremos *sin justificar clásicamente la elección de los operadores*.

El operador posición  $\hat{r}$  se define mediante la relación

$$\hat{r}\phi(r, t) = r\phi(r, t) \quad (7.3.1)$$

y el operador momento  $\hat{p}$  mediante la operación

$$\hat{p}\phi(r, t) = -i\hbar \nabla \phi(r, t) \quad (7.3.2)$$

En general,

$$F(r, p) \rightarrow F(\hat{r}, \hat{p}) \quad (7.3.3)$$

es un operador construido a partir de una función de la posición y el momento. La energía clásica de una partícula

$$E(r, p) = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (7.3.4)$$

tiene, en Mecánica Cuántica, la expresión

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \quad (7.3.5)$$

que corresponde al Hamiltoniano.

## 7.4 Valores esperados y observables

La relación entre operadores y el resultado de mediciones se establece en Mecánica Cuántica por medio de la correspondencia entre el *valor esperado* de un dado operador  $\hat{O}$  y el *observable* asociado

$$\langle \hat{O} \rangle = \int \phi^*(r, t) \hat{O} \phi(r, t) d^3r \quad (7.4.1)$$

Si consideramos al operador posición (7.3.1) su valor esperado se escribe

$$\begin{aligned} \langle \hat{r} \rangle &= \int \phi^*(r, t) \hat{r} \phi(r, t) d^3r \\ &= \int \phi^*(r, t) r \phi(r, t) d^3r \\ &= \int \phi^*(r, t) \phi(r, t) r d^3r \\ &= \int |\phi(r, t)|^2 r d^3r \\ &= \int P(r, t) r d^3r \end{aligned} \quad (7.4.2)$$

Este es un resultado muy importante, ya que nos permite interpretar el valor esperado del operador posición como la integral del producto de la función de distribución de probabilidad  $P(r, t) d^3r$  por el valor de la posición  $r$ . Análogamente, para el valor esperado del momento (7.3.2) tenemos

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle &= \int \phi^*(r, t) \hat{p} \phi(r, t) d^3r \\ &= \int \phi^*(r, t) (-i\hbar\nabla) \phi(r, t) d^3r \end{aligned} \quad (7.4.3)$$

Notemos que en este caso debemos respetar el ordenamiento en el integrando, ya que la acción de  $\hat{p}$  sobre el estado produce un resultado que depende de la estructura explícita del estado. Esta es una característica fundamental de los operadores: su aplicación debe respetar estrictamente el orden de aparición respecto a la función de estado sobre la que actúan. Para el ejemplo anterior es claro que

$$\hat{p}(\hat{r}\phi(r, t)) \neq \hat{r}(\hat{p}\phi(r, t)) \quad (7.4.4)$$

De hecho, podemos demostrar que

$$\begin{aligned} [\hat{p}, \hat{r}]\phi(r, t) &= (\hat{p}\hat{r} - \hat{r}\hat{p})\phi(r, t) \\ &= -i\hbar\phi(r, t) \end{aligned} \quad (7.4.5)$$

y esto implica que

$$[\hat{p}, \hat{r}] = -i\hbar \quad (7.4.6)$$

La demostración es muy simple y está basada en las definiciones de partida:

$$\begin{aligned} \hat{p}(\hat{r}\phi(r, t)) &= \hat{p}(r\phi(r, t)) \\ &= -i\hbar\nabla(r\phi(r, t)) \\ &= -i\hbar\phi(r, t) - i\hbar r \cdot (\nabla\phi(r, t)) \end{aligned} \quad (7.4.7)$$

mientras

$$\hat{r}(\hat{p}\phi(r, t)) = -i\hbar r \cdot (\nabla\phi(r, t)) \quad (7.4.8)$$

de manera que restando las expresiones anteriores obtenemos el resultado buscado, (7.4.6), que expresa el valor de la *conmutación* de los operadores momento y posición. Retornaremos a este resultado más adelante en este capítulo.

La definición de valor esperado

$$\langle \hat{O} \rangle = \int \phi^*(r, t) \hat{O}\phi(r, t) d^3r \quad (7.4.9)$$

no es una afirmación sobre algún valor particular de la medida, representa, en cambio, un valor medio. Los operadores que poseen valores medios reales cualesquiera sea el estado  $\phi(r, t)$  sobre el que actúen se denominan *operadores hermíticos o auto-adjuntos*, de modo que

$$\begin{aligned} \int \phi^*(r, t) \hat{O}\phi(r, t) d^3r &= \int \phi(r, t) (\hat{O}\phi(r, t))^* d^3r \\ &= \int (\hat{O}\phi(r, t))^* \phi(r, t) d^3r \end{aligned} \quad (7.4.10)$$

por lo tanto *podemos interpretar a los observables (i.e: resultado de mediciones) como los valores esperados de operadores hermíticos*. Si un operador es hermítico, entonces, para cualquier par de funciones de onda se verifica

$$\int \phi_a^*(r, t) \hat{O}\phi_b(r, t) d^3r = \int (\hat{O}\phi_a(r, t))^* \phi_b(r, t) d^3r \quad (7.4.11)$$

A continuación veremos cual es el equivalente cuántico al concepto de superposición clásico.

## 7.5 Operadores lineales

En general, para un conjunto completo de funciones de onda  $\phi_k(r, t)$  podemos escribir

$$\phi(r, t) = \sum_k a_k \phi_k(r, t) \quad (7.5.1)$$

Esta es una *combinación lineal*, que expresa a la función de onda  $\phi(r, t)$  en la base  $(\phi_k(r, t))$ . Los factores  $a_k$  son, en general, números complejos. Si la aplicación de un operador sobre (7.5.1) resulta en

$$\hat{O}\phi(r, t) = \sum_k a_k \hat{O}\phi_k(r, t) \quad (7.5.2)$$

el operador se denomina *operador lineal*

## 7.6 Espectro de operadores, ortonormalidad

Retornemos al concepto de valor esperado de un operador hermítico. Si ese valor se corresponde con el resultado de una medición podemos preguntarnos si es posible encontrar un estado para el cual la desviación del valor esperado del operador se anule. La desviación del valor esperado se escribe

$$\begin{aligned} (\Delta\hat{O})^2 &= \int \phi^*(r, t)(\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle)^2 \phi(r, t) d^3r \\ &= \int \phi^*(r, t)(\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle)(\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle)\phi(r, t) d^3r \\ &= \int [(\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle)\phi(r, t)]^* [(\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle)\phi(r, t)] d^3r \\ &= \int |(\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle)\phi(r, t)|^2 d^3r \end{aligned} \quad (7.6.1)$$

por lo tanto, la desviación del valor medio se anulará si

$$(\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle)\phi(r, t) = 0 \quad (7.6.2)$$

En otras palabras, si al actuar sobre  $\phi(r, t)$  se verifica

$$\hat{O}\phi(r, t) = \langle \hat{O} \rangle \phi(r, t) \quad (7.6.3)$$

diremos que el valor esperado  $\langle \hat{O} \rangle$  coincide con un *valor propio* o *autovalor* de  $\hat{O}$  y que  $\phi(r, t)$  es una *autofunción* o *función propia* del operador  $\hat{O}$ . Para este caso, la desviación del valor medio se anula y como hemos supuesto que el operador es hermítico, el valor esperado es real.

Un operador hermítico posee, en general, un conjunto de autofunciones y para cada uno de ellas se cumplirá

$$\hat{O}\phi_k(r, t) = \lambda_k \phi_k(r, t) \quad (7.6.4)$$

A cada autofunción  $\phi_k(r, t)$  del operador le corresponde un valor propio  $\lambda_k$ . Diremos que el conjunto de valores propios  $\lambda_k, k = 1, 2, \dots, n..$  forma el *espectro* de valores propios del operador hermítico  $\hat{O}$  y que el conjunto de funciones  $\phi_k(r, t)$  forma el conjunto de funciones propias del operador.

La propiedad de *ortogonalidad* entre funciones propias  $(k, l)$  de un dado operador hermítico se expresa mediante la integral

$$\int \phi_k^*(r, t)\phi_l(r, t) d^3r \quad (7.6.5)$$

que representa una operación análoga al producto escalar entre vectores. Si calculamos los valores esperados entre las funciones propias de un dado operador hermítico, se obtiene

$$\begin{aligned}\int \phi_k^*(r, t) \hat{O} \phi_l(r, t) d^3 r &= \lambda_l \int \phi_k^*(r, t) \phi_l(r, t) d^3 r \\ \int (\hat{O} \phi_k(r, t))^* \phi_l(r, t) d^3 r &= \lambda_k^* \int \phi_k^*(r, t) \phi_l(r, t) d^3 r\end{aligned}\quad (7.6.6)$$

Como el operador es hermítico, los autovalores  $\lambda_k, k = 1, 2, \dots, n$  son reales, de modo que al tomar la diferencia entre ambas igualdades resulta

$$(\lambda_k - \lambda_l) \int \phi_k^*(r, t) \phi_l(r, t) d^3 r = 0 \quad (7.6.7)$$

y esto implica

$$\int \phi_k^*(r, t) \phi_l(r, t) d^3 r = 0 \quad (7.6.8)$$

si

$$(\lambda_k - \lambda_l) \neq 0 \quad (7.6.9)$$

Diremos que tal conjunto de estados es *no-degenerado* si a cada autovalor  $\lambda_k$  le corresponde un único autoestado  $\phi_k(r, t)$ . Por lo tanto, diremos que dos estados son ortogonales si la integral de la ecuación anterior se anula. En general, escribiremos la condición de *ortonormalidad* entre estados pidiendo que

$$\int \phi_k^*(r, t) \phi_l(r, t) d^3 r = \delta_{k,l} \quad (7.6.10)$$

donde  $\delta_{k,l} = 1$  si  $k = l$ , o 0 si  $k \neq l$ . Diremos que el conjunto de autoestados es *completo* si para la función de onda del sistema considerado se puede escribir

$$\phi(r, t) = \sum_k a_k \phi_k(r, t) \quad (7.6.11)$$

donde los factores  $a_k$  son, en general, valores complejos. Si efectuamos el producto escalar entre ésta función de onda y una dada autofunción, obtenemos

$$\begin{aligned}\int \phi_k^*(r, t) \phi(r, t) d^3 r &= \sum_l a_l \int \phi_k^*(r, t) \phi_l(r, t) d^3 r \\ &= \sum_l a_l \delta_{k,l} \\ &= a_k\end{aligned}\quad (7.6.12)$$

Escribiremos ahora el valor esperado del operador  $\hat{O}$

$$\begin{aligned}\langle \hat{O} \rangle &= \sum_{k,l} a_k^* a_l \int \phi_k^*(r, t) \hat{O} \phi_l(r, t) d^3 r \\ &= \sum_{k,l} a_k^* a_l \int \phi_k^*(r, t) \lambda_l \phi_l(r, t) d^3 r \\ &= \sum_{k,l} a_k^* a_l \lambda_l \int \phi_k^*(r, t) \phi_l(r, t) d^3 r \\ &= \sum_{k,l} a_k^* a_l \lambda_l \delta_{k,l} \\ &= \sum_k |a_k|^2 \lambda_k\end{aligned}\quad (7.6.13)$$

El resultado anterior es muy importante y establece que:

*El valor esperado de un operador hermítico sobre una función de onda, expresada como combinación lineal de las autofunciones del operador, es igual a la suma de los valores esperados del operador sobre cada uno de sus autofunciones multiplicados por el cuadrado de la amplitud de cada autofunción.*

Como la función de onda está normalizada

$$\begin{aligned} \int \phi^*(r, t) \phi(r, t) d^3r &= \sum_{k,l} a_k^* a_l \int \phi_k^*(r, t) \phi_l(r, t) d^3r \\ &= \sum_k |a_k|^2 \\ &= 1 \end{aligned} \tag{7.6.14}$$

podemos interpretar a los factores

$$P_k = |a_k|^2 \tag{7.6.15}$$

como la probabilidad asociada al autoestado  $k$  en la combinación lineal, ya que estos factores son cantidades definidas positivas cuya suma es igual a la unidad. De esta manera, podemos re-interpretar el significado del valor esperado de un operador hermítico sobre una dada función de onda de la manera siguiente:

i) la medición del observable correspondiente al operador dará como resultado el valor esperado del operador;

ii) este valor esperado es igual a la superposición del espectro de valores propios del operador y cada término está pesado por el cuadrado del módulo de la amplitud correspondiente a cada autofunción en la función de onda.

iii) el valor esperado del operador coincidirá con uno de sus autovalores *sólo si* la función de onda sobre la que actúa es una función pura, para la que solamente una de las amplitudes es igual a la unidad y el resto se anula.

## 7.7 Ecuación de Schrödinger

Hasta ahora hemos discutido las propiedades básicas de la representación (operadores, funciones de estado, funciones propias, valores esperados) a un dado tiempo  $t$ . En la mecánica cuántica la evolución temporal de la función de estado  $\phi(r, t)$ <sup>1</sup>

$$\frac{\partial \phi(r, t)}{\partial t} \tag{7.7.1}$$

está determinada por la aplicación del operador Hamiltoniano

$$\hat{H}\phi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \phi(r, t)}{\partial t} \tag{7.7.2}$$

Esta es la llamada *ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo*. Es una ecuación diferencial de primer orden en el tiempo. En este capítulo no intentaremos justificar la

---

<sup>1</sup>A partir de ahora nos referiremos indistintamente a funciones de estado o funciones de onda, ya que trabajaremos en el marco de una dada representación

forma de esta ecuación, simplemente aprenderemos a utilizarla y a extraer consecuencias de interés físico a partir de ella.

Si el operador  $\hat{H}$  no depende explícitamente del tiempo, podemos intentar una solución de la forma

$$\phi(r, t) = e^{-iEt/\hbar} \phi(r) \quad (7.7.3)$$

donde  $E$  es una cantidad real que posee dimensiones de energía,  $t$  es el tiempo y  $\phi(r)$  es una función que solamente depende de la posición. Utilizando esta solución en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, obtenemos la ecuación

$$\hat{H}\phi(r) = E\phi(r) \quad (7.7.4)$$

que es la llamada *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*. Notemos que para llegar a este resultado hemos calculado explícitamente la derivada temporal de la función de estado y eliminado en ambos miembros de la igualdad el factor exponencial:

$$\begin{aligned} \hat{H}\phi(r, t) &= i\hbar \frac{\partial \phi(r, t) = e^{-iEt/\hbar} \phi(r)}{\partial t} \\ &= E e^{-iEt/\hbar} \phi(r) \\ &= E \phi(r, t) \end{aligned} \quad (7.7.5)$$

En definitiva (7.7.4) se obtiene eliminando el factor  $e^{-iEt/\hbar}$  a ambos lados de la igualdad en (7.7.5).

## 7.8 Estados estacionarios

Cada uno de los autoestados  $\phi_k(r)$ ,  $k = 1, 2, \dots, n$  del operador hermítico  $\hat{H}$  correspondiente a un dado sistema físico es solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con autovalor  $E_k$

$$\hat{H}\phi_k(r) = E_k \phi_k(r) \quad (7.8.1)$$

El conjunto de autoestados  $\phi_k(r)$ , con  $k = 1, 2, \dots$  forma un conjunto completo de funciones. Esto significa que los autovalores recorren el espectro completo del operador. Bajo estas condiciones cada uno de esos autoestados es un *estado estacionario* del sistema y la probabilidad asignada a cada uno de ellos se define

$$P_k(r) d^3r = |\phi_k(r)|^2 d^3r \quad (7.8.2)$$

y es *independiente del tiempo*. Como los estados están normalizados, se cumple que

$$\int P_k(r) d^3r = \int |\phi_k(r)|^2 d^3r = 1 \quad (7.8.3)$$

Si ahora consideramos la superposición de estados, tendremos para la función de estado del sistema

$$\begin{aligned} \phi(r, t) &= \sum_{k=1}^n a_k \phi_k(r, t) \\ &= \sum_{k=1}^n a_k e^{-iE_k t/\hbar} \phi_k(r) \end{aligned} \quad (7.8.4)$$

## 7.9 Cuadro comparativo de conceptos clásicos y cuánticos

En forma sucinta, las diferencias básicas que existen entre la Mecánica Clásica y la Cuántica se pueden indicar en la tabla siguiente:

Mecánica Clásica	Mecánica Cuántica
Ecuaciones diferenciales	Operadores
ecuaciones de movimiento	acción de operadores sobre estados
trayectorias	valores propios
variaciones continuas	variaciones discretas
medidas	observables

En los capítulos siguientes analizaremos con más detalle estas diferencias, a medida que se nos presenten al describir casos concretos.

## 7.10 Oscilaciones del valor esperado

Como ejemplo de aplicación de los conceptos que hemos presentado, consideremos el caso del valor esperado de un operador hermítico tomado sobre la superposición de dos estados de un dado Hamiltoniano. En consecuencia

$$\phi(r, t) = \sum_{k=1}^2 a_k e^{-iE_k t/\hbar} \phi_k(r) \quad (7.10.1)$$

es la función de estado sobre la que actuará el operador. Suponemos que el operador no contiene derivadas temporales y su valor esperado, al tiempo  $t$ , es

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle &= \int \phi^*(r, t) \hat{O} \phi(r, t) d^3r \\ &= \sum_{k,l=1}^2 a_k^* a_l e^{i(E_k - E_l)t/\hbar} \int \phi_k^*(r) \hat{O} \phi_l(r) d^3r \\ &= \sum_{k,l=1}^2 a_k^* a_l e^{i(E_k - E_l)t/\hbar} O_{kl} \end{aligned} \quad (7.10.2)$$

donde hemos definido

$$O_{kl} = \int \phi_k^*(r) \hat{O} \phi_l(r) d^3r \quad (7.10.3)$$

Si desarrollamos la suma obtenemos

$$\langle \hat{O} \rangle = |a_1|^2 O_{11} + |a_2|^2 O_{22} + a_1^* a_2 e^{i\omega t} O_{12} + a_2^* a_1 e^{-i\omega t} O_{21} \quad (7.10.4)$$

donde hemos escrito

$$\omega = (E_1 - E_2)/\hbar \quad (7.10.5)$$

si además  $O_{12}^* = O_{21}$ , como corresponde a un operador hermítico, el valor esperado del operador toma la forma

$$\langle \hat{O} \rangle = |a_1|^2 O_{11} + |a_2|^2 O_{22} + 2\text{Re}[a_1^* a_2 e^{i\omega t} O_{12}] \quad (7.10.6)$$

La operación  $Re[.]$  indica que debemos tomar la parte real de la cantidad entre corchetes.

El resultado anterior nos muestra que en la Mecánica Cuántica el valor esperado de un operador hermítico es, en general, una función del tiempo. Para el caso estudiado el valor esperado oscila entre los valores extremos con un periodo igual a  $T = \frac{2\pi\hbar}{|E_1 - E_2|}$ . Este período es una función de la diferencia de energía entre estados, de acuerdo a la expresión de  $\omega$ .

## 7.11 Principio de incerteza

Para finalizar con esta breve introducción a los conceptos cuánticos ilustraremos, mediante una demostración simple, el Principio de Incerteza enunciado originalmente por W. Heisenberg.

Consideremos dos operadores hermíticos,  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$ , cuyos valores esperados son  $\langle \hat{A} \rangle$  y  $\langle \hat{B} \rangle$ , respectivamente. Los operadores

$$\begin{aligned}\hat{\alpha} &= \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \\ \hat{\beta} &= \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle\end{aligned}\quad (7.11.1)$$

son también hermíticos y sus valores esperados son nulos. Sea  $\phi$  una función de onda, cuya norma es definida positiva o nula

$$\int d^3x \phi^* \phi \geq 0 \quad (7.11.2)$$

Consideremos la función

$$\psi = (\hat{\alpha} - i\lambda\hat{\beta})\phi \quad (7.11.3)$$

donde  $\lambda$  es real. La norma de esta función

$$\int d^3x \psi^* \psi \quad (7.11.4)$$

será definida positiva o nula si

$$\begin{aligned}\int d^3x \psi^* \psi &= \int d^3x \phi^* (\hat{\alpha} + i\lambda\hat{\beta})(\hat{\alpha} - i\lambda\hat{\beta})\phi \\ &= \langle \hat{\alpha}^2 \rangle + \lambda^2 \langle \hat{\beta}^2 \rangle - i\lambda \langle [\hat{\alpha}, \hat{\beta}] \rangle \geq 0\end{aligned}\quad (7.11.5)$$

En la expresión anterior

$$\begin{aligned}\langle \hat{\alpha}^2 \rangle &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 = (\Delta A)^2 \\ \langle \hat{\beta}^2 \rangle &= \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2 = (\Delta B)^2\end{aligned}\quad (7.11.6)$$

Por lo tanto, reemplazando estos valores, la condición para la norma se escribe

$$(\Delta A)^2 + \lambda^2 (\Delta B)^2 - i\lambda \langle [A, B] \rangle \geq 0 \quad (7.11.7)$$

Si definimos ahora el operador

$$\hat{C} = -i\lambda \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \quad (7.11.8)$$

que es hermítico, resulta

$$(\Delta A)^2 + \lambda^2(\Delta B)^2 + \hat{C} \geq 0 \quad (7.11.9)$$

que se puede re-escribir de la forma

$$[\Delta A - \lambda\Delta B]^2 + (2\lambda\Delta A\Delta B + \hat{C}) \geq 0 \quad (7.11.10)$$

y esta desigualdad se satisface si

$$\Delta A\Delta B \geq \frac{i}{2}\langle[A, B]\rangle \quad (7.11.11)$$

para cualquier valor de  $\lambda$ . Por lo tanto, el producto de las desviaciones de los operadores A y B es mayor o igual que el valor esperado del conmutador de ambos operadores. A partir de este resultado es fácil mostrar que si  $\hat{A} = \hat{p}$  y  $\hat{B} = \hat{x}$  entonces

$$\Delta p\Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (7.11.12)$$

como hemos discutido anteriormente. Este resultado expresa una propiedad más general, que está referida a la condición de pares de operadores conjugados. Según esta condición diremos que un par de operadores son conjugados si sus desviaciones satisfacen relaciones de conmutación como la que hemos discutido y por lo tanto, el producto de dichas desviaciones posee una cota inferior.

## 7.12 Resumen del capítulo.

- *Estado de un sistema.*
- *Operadores.*
- *Valores esperados y observables.*
- *Espectro de operadores, ortonormalidad.*
- *Valores esperados, desviaciones de los valores esperados.*
- *Ecuación de Schrödinger.*
- *Estados estacionarios.*
- *Cuadro comparativo de conceptos clásicos y cuánticos.*
- *Oscilaciones del valor esperado.*
- *Principio de Incerteza.*

## 7.13 Problemas

1. A partir de la definición del momento angular

$$l = r \times p \quad (7.13.1)$$

construir el operador respectivo y calcular los conmutadores

$$\begin{aligned} C(l_\alpha, x_\beta) &= [l_\alpha, x_\beta] \\ C(l_\alpha, p_\beta) &= [l_\alpha, p_\beta] \\ C(l_\alpha, l_\beta) &= [l_\alpha, l_\beta] \end{aligned} \quad (7.13.2)$$

donde los subíndices  $\alpha$  y  $\beta$  representan las componentes cartesianas.

2. Calcular la desviación estandar de la posición  $x$  y del momento  $p = -i\hbar\nabla$ , en los estados

$$\begin{aligned} \Psi_I(x) &= N_I e^{-\alpha x^2/2} \\ \Psi_{II}(x) &= N_{II}(\beta + \gamma x^2)e^{-\alpha x^2/2} \end{aligned} \quad (7.13.3)$$

donde  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  son constantes. Calcule el valor de las constantes de normalización  $N_I$  y  $N_{II}$ . Las funciones están definidas en el intervalo  $-\infty < x < \infty$ .

3. Calcule los conmutadores de los operadores representados por las siguientes matrices

$$\begin{aligned} O_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ O_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ O_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7.13.4)$$

¿Qué puede afirmar respecto a los autovalores y autovectores correspondientes?

## Capítulo 8

# EL OSCILADOR ARMÓNICO

### 8.1 Introducción

En este capítulo nos dedicaremos a explorar sistemáticamente las consecuencias de los postulados de la Mecánica Cuántica, de acuerdo a la discusión que desarrollamos en el capítulo anterior. Para ello tomaremos el sistema que mejor conocemos en física, luego de la partícula libre: el oscilador armónico. Analizaremos el caso unidimensional y estableceremos la correspondencia entre los resultados clásicos y los cuánticos.

### 8.2 Hamiltoniano

La energía del oscilador armónico unidimensional clásico está dada por la expresión:

$$E(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \quad (8.2.1)$$

El primer término representa la energía cinética para una partícula de masa  $m$  y  $k$  es la constante del oscilador. Recordemos que la expresión clásica de la fuerza es

$$F = -kx \quad (8.2.2)$$

y no es otra cosa sino el gradiente del potencial escalar  $V(x) = \frac{kx^2}{2}$ . La frecuencia del oscilador clásico vale

$$\omega^2 = \frac{k}{m} \quad (8.2.3)$$

y las soluciones, para el momento y la coordenada, son de la forma

$$\begin{aligned} x(t) &= A \cos \omega t \\ p(t) &= -m\omega A \sin \omega t \end{aligned} \quad (8.2.4)$$

donde  $A$  es la *amplitud* de la oscilación. El reemplazo de este valor en la expresión de la energía conduce al resultado clásico

$$\begin{aligned} E &= \frac{m\omega^2 A^2 \sin^2 \omega t}{2} + \frac{kA^2 \cos^2 \omega t}{2} \\ &= \frac{m\omega^2 A^2}{2} \end{aligned} \quad (8.2.5)$$

Si ahora reemplazamos la coordenada y el momento por los operadores posición y momento, resulta

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{kx^2}{2} \quad (8.2.6)$$

Este es el Hamiltoniano del oscilador armónico unidimensional.

### 8.3 Autoestados del oscilador

En el caso unidimensional que estamos estudiando la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo toma la forma

$$\begin{aligned} \hat{H}\phi(x) &= E\phi(x) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{kx^2}{2}\right) \phi(x) &= E\phi(x) \end{aligned} \quad (8.3.1)$$

donde  $\phi(x)$  y  $E$  representan las auto-funciones y los auto-valores del operador  $\hat{H}$ . Si definimos el factor de escala (*parámetro del oscilador*)

$$b_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (8.3.2)$$

y efectuamos el cambio de variables

$$\rho = \frac{x}{b_0} \quad (8.3.3)$$

la ecuación diferencial puede re-escribirse en forma adimensional usando las relaciones

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} &= \frac{d}{d\rho} \frac{d\rho}{dx} \\ &= \frac{1}{b_0} \frac{d}{d\rho} \\ \frac{d^2}{dx^2} &= \frac{1}{b_0^2} \frac{d^2}{d\rho^2} \end{aligned} \quad (8.3.4)$$

de donde resulta

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{kx^2}{2}\right) \phi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} - \frac{x^2}{b_0^4}\right) \phi(x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2mb_0^2} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^2\right) \phi(\rho) \\ &= -\frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^2\right) \phi(\rho) \end{aligned} \quad (8.3.5)$$

A partir de esta transformación podemos re-escribir la ecuación de Schrödinger de la manera siguiente

$$-\frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^2\right) \phi(\rho) = E\phi(\rho) \quad (8.3.6)$$

y por lo tanto

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^2\right)\phi(\rho) = -\frac{2E}{\hbar\omega}\phi(\rho) \tag{8.3.7}$$

La cantidad  $\hbar\omega$  tiene unidades de energía, de modo que el factor en frente de la función de onda, a la derecha de la igualdad en (8.3.7), es adimensional. Si llamamos  $\nu$  a ese factor ( $\nu = \frac{2E}{\hbar\omega}$ ) y pasamos ese término a la izquierda de la igualdad, podemos re-escribir (8.3.7) de la manera siguiente

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \rho^2 + \nu\right)\phi(\rho) = 0 \tag{8.3.8}$$

Efectuaremos ahora un re-arreglo de la ecuación (8.3.8) considerando que la solución de la misma es de la forma

$$\phi(\rho) = e^{-\rho^2/2}F(\rho) \tag{8.3.9}$$

Si calculamos las derivadas de esta función con respecto a la variable  $\rho$  obtenemos los resultados siguientes

$$\begin{aligned} \frac{d\phi(\rho)}{d\rho} &= e^{-\rho^2/2} \left(\frac{dF(\rho)}{d\rho} - \rho F(\rho)\right) \\ \frac{d^2\phi(\rho)}{d\rho^2} &= e^{-\rho^2/2} \left(\frac{d^2F(\rho)}{d\rho^2} - 2\rho\frac{dF(\rho)}{d\rho} - (1 - \rho^2)F(\rho)\right) \end{aligned} \tag{8.3.10}$$

Reemplazando en la ecuación (8.3.8) obtenemos una ecuación diferencial para la función  $F(\rho)$ , que es de la forma

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - 2\rho\frac{d}{d\rho} + (\nu - 1)\right)F(\rho) = 0 \tag{8.3.11}$$

La solución general de esta ecuación diferencial puede expresarse en forma polinomial

$$F(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \tag{8.3.12}$$

Reemplazando en la ecuación diferencial y luego de calcular las derivadas correspondientes obtenemos

$$\sum_{k=0}^{\infty} [k(k-1)\rho^{k-2} - (2k - \nu + 1)\rho^k] a_k = 0 \tag{8.3.13}$$

y a partir de esta ecuación podemos escribir el desarrollo en potencias

$$\begin{aligned} [(\nu - 1)a_0 + 2a_2] &+ [(\nu - 3)a_1 + 6a_3]\rho + [(\nu - 5)a_2 + 12a_4]\rho^2 + \\ \dots &+ [(\nu - 2q - 1)a_q + (q + 2)(q + 1)a_{q+2}]\rho^q + \dots = 0 \end{aligned} \tag{8.3.14}$$

La anulación de los coeficientes de este desarrollo se cumplirá, término a término si:

$$\begin{aligned} a_2 &= -\frac{(\nu - 1)}{2}a_0 \\ a_3 &= -\frac{(\nu - 3)}{3 \cdot 2}a_1 \\ a_4 &= -\frac{(\nu - 5)}{4 \cdot 3}a_2 \\ \dots & \\ a_{q+2} &= -\frac{(\nu - (2q + 1))}{(q + 2)(q + 1)}a_q \\ \dots & \end{aligned} \tag{8.3.15}$$

Los coeficientes correspondientes a potencias pares e impares de  $\rho$  forman conjuntos independientes de valores y por lo tanto no pueden aparecer simultáneamente en la expresión de  $F(\rho)$ . Además, para un dado valor de  $\nu$ , las relaciones entre coeficientes pertenecientes a un mismo conjunto (pares o impares) son excluyentes e implican la aparición de un valor máximo en  $q$  para cada valor de  $\nu$ . Para estudiar la estructura de los coeficientes de  $F(\rho)$  variaremos gradualmente los valores de  $\nu$ . Si

$$F(\rho) = a_0 \quad (8.3.16)$$

la ecuación diferencial se reduce a

$$(\nu - 1)a_0 = 0 \quad (8.3.17)$$

y se cumple si  $\nu = 1$  para  $a_0 \neq 0$ . Para este valor de  $\nu$  obtenemos

$$\begin{aligned} E(\nu = 1) &= \frac{1}{2}\hbar\omega \\ \phi(\rho) &= a_0 e^{-\rho^2/2} \end{aligned} \quad (8.3.18)$$

Si suponemos

$$F(\rho) = a_0 + a_1\rho \quad (8.3.19)$$

la ecuación diferencial se escribe

$$(\nu - 1)a_0 + (\nu - 3)a_1\rho = 0 \quad (8.3.20)$$

y se satisface solo si  $\nu = 3$ ,  $a_0 = 0$ , y  $a_1 \neq 0$ . Para este valor de  $\nu$  obtenemos

$$\begin{aligned} E(\nu = 3) &= \frac{3}{2}\hbar\omega \\ \phi(\rho) &= a_1\rho e^{-\rho^2/2} \end{aligned} \quad (8.3.21)$$

Análogamente, para

$$F(\rho) = a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2 \quad (8.3.22)$$

la ecuación diferencial toma la forma

$$(2a_2 + (\nu - 1)a_0) + \rho(\nu - 3)a_1 + \rho^2(\nu - 5)a_2 = 0 \quad (8.3.23)$$

y se cumple para  $\nu = 5$ ,  $a_0 \neq 0$ ,  $a_1 = 0$ , y  $a_2 = -2a_0$ . Para el valor  $\nu = 5$  obtenemos

$$\begin{aligned} E(\nu = 5) &= \frac{5}{2}\hbar\omega \\ \phi(\rho) &= a_0(1 - 2\rho^2)e^{-\rho^2/2} \end{aligned} \quad (8.3.24)$$

En definitiva, hemos demostrado que los valores de  $\nu$  permitidos son los enteros impares 1,3,5...y las funciones  $F_\nu(\rho)$  son tales que:

- i) *no contienen simultáneamente potencias pares e impares de  $\rho$*
- ii) *poseen un número máximo de términos, que está determinado por el valor máximo del exponente  $k_{max} = \frac{(\nu-1)}{2}$ .*

Esta última condición es una consecuencia directa de la estructura propuesta para la solución, ya que si  $F(\rho)$  fuese una serie de infinitos términos y no un polinomio con un

número finito de términos, su comportamiento asintótico en el límite  $\rho \rightarrow \infty$  sería comparable al de una función exponencial y por lo tanto la función  $\phi(\rho)$  no resultaría acotada. Recordemos que esta última propiedad está relacionada con la forma del potencial, que crece como el cuadrado de  $\rho$  y por lo tanto la función de onda tomará valores significativos en las regiones correspondientes a bajos valores de  $\rho$ . Por último, conviene recordar que la condición de corte en las potencias de  $\rho$  que aparecen en  $F(\rho)$  no condiciona los valores de la función  $F(\rho)$ , que puede tomar valores muy grandes o infinitos cuando  $\rho$  tiende a infinito, sino la convergencia de  $\phi(\rho)$ .

Es fácil ver que las funciones de onda  $\phi_n(\rho)$  se generan a partir de la aplicación

$$\phi_n(\rho) = \left( \rho - \frac{d}{d\rho} \right)^n e^{-\rho^2/2} \quad (8.3.25)$$

para  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Las funciones  $F(\rho)$  pertenecen a una clase de funciones especiales (polinomios ortonormales) y para el caso del oscilador armónico, los polinomios correspondientes son los polinomios de Hermite. En lo que sigue nos referiremos a los polinomios de Hermite como al conjunto de polinomios que cumplen con las condiciones impuestas a  $F(\rho)$  y cuyos coeficientes y orden se determinan en forma análoga a la que hemos discutido para el caso de la función  $F(\rho)$ .

Comparando la ecuación que cumple  $F(\rho)$  con la ecuación diferencial que satisfacen los *polinomios de Hermite*  $H_n(\rho)$

$$\left( \frac{d^2}{d\rho^2} - 2\rho \frac{d}{d\rho} + 2n \right) H_n(\rho) = 0 \quad (8.3.26)$$

podemos establecer la correspondencia

$$\begin{aligned} F(\rho) &\rightarrow H_n(\rho) \\ (\nu - 1) &\rightarrow 2n \end{aligned} \quad (8.3.27)$$

Los polinomios de Hermite  $H_n(\rho)$  son polinomios de orden  $n$  en la variable  $\rho$ . En virtud de la correspondencia establecida entre el valor de  $\nu$  y el valor del índice  $n$  podemos escribir *la condición de cuantificación de la energía*, para el espectro del oscilador cuántico unidimensional

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{2E}{\hbar\omega} = (2n + 1) \\ E_n &= \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \\ n &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (8.3.28)$$

Esta condición resulta del criterio de convergencia impuesto a  $F(\rho)$ . Los polinomios de Hermite forman un conjunto completo de funciones reales de la variable  $\rho$ . Los polinomios pares e impares están definidos por la sumas:

$$\begin{aligned} H_n(\rho) &= \sum_{k=0}^{k_{max}} a_{2k} \rho^{2k} & k_{max} &= \frac{n}{2} \quad (n \text{ par}) \\ H_n(\rho) &= \sum_{k=0}^{k_{max}} a_{2k+1} \rho^{2k+1} & k_{max} &= \frac{n-1}{2} \quad (n \text{ impar}) \end{aligned} \quad (8.3.29)$$

Las siguientes son propiedades de los polinomios de Hermite que resultan muy útiles a la hora de efectuar cálculos

a) *Ortogonalidad*

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\rho^2} H_n(\rho) H_m(\rho) d\rho = \delta_{n,m} 2^n n! \sqrt{\pi} \quad (8.3.30)$$

b) *Recurrencia*

$$H_{n+1}(\rho) - 2\rho H_n(\rho) + 2n H_{n-1}(\rho) = 0 \quad (8.3.31)$$

c) *Derivadas*

$$\begin{aligned} \frac{dH_n(\rho)}{d\rho} &= 2n H_{n-1}(\rho) \\ \frac{dH_n(\rho)}{d\rho} &= 2\rho H_n(\rho) - H_{n+1}(\rho) \end{aligned} \quad (8.3.32)$$

La forma explícita de los primeros ( $n \leq 4$ ) polinomios de Hermite es la siguiente

$$\begin{aligned} H_0(\rho) &= 1 \\ H_1(\rho) &= 2\rho \\ H_2(\rho) &= 4\rho^2 - 2 \\ H_3(\rho) &= 8\rho^3 - 12\rho \\ H_4(\rho) &= 16\rho^4 - 48\rho^2 + 12 \end{aligned} \quad (8.3.33)$$

## 8.4 Funciones de onda normalizadas

Las funciones de onda independientes del tiempo (estados estacionarios del oscilador) normalizadas se escriben

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! b_0 \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2b_0^2}} H_n\left(\frac{x}{b_0}\right) \quad (8.4.1)$$

A partir de estas funciones de onda normalizadas, la distribución espacial de probabilidad, en el estado  $n$ -ésimo del oscilador, se escribe

$$P_n(x) dx = |\phi_n(x)|^2 dx \quad (8.4.2)$$

Como las funciones están normalizadas, la integración sobre todo el espacio ( $-\infty < x < \infty$ ) de la distribución (8.4.2) es igual a 1 para todo  $n$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} P_n(x) dx = 1 \quad (8.4.3)$$

La Figura 8.1 muestra los valores de las funciones de onda independientes del tiempo, para algunos valores de  $n$ .

La Figura 8.2 muestra los valores de la distribución de probabilidad para las funciones de onda mostradas en la Figura 8.1.

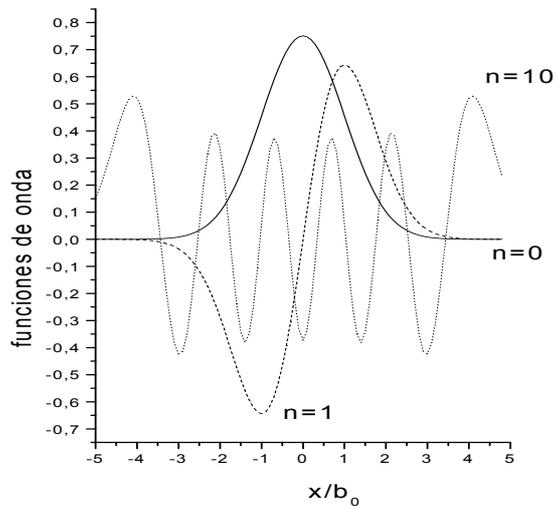


Figura 8.1: Funciones de onda del oscilador armónico unidimensional, para los números cuánticos  $n = 0, 1$  y  $n = 10$ , como función de la variable  $x/b_0$

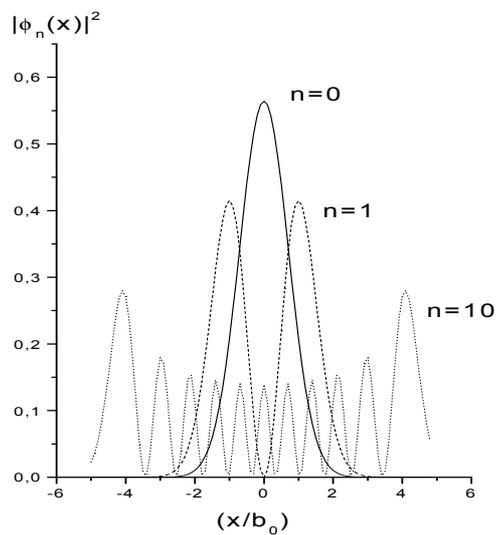


Figura 8.2: Cuadrado del módulo de las funciones de onda del oscilador que se muestran en la figura 8.1

La dependencia temporal, para cada autoestado del oscilador armónico es:

$$\phi_n(x, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \phi_n(x) \quad (8.4.4)$$

con  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ .

Calcularemos ahora los valores esperados y las desviaciones de los operadores  $\hat{x}$ ,  $\hat{x}^2$ ,  $\hat{p}$ ,  $\hat{p}^2$  sobre autoestados del oscilador armónico. Presentaremos en detalle el cálculo de uno de estos operadores y dejaremos como ejercicio para el lector la demostración de los restantes valores. En todos los casos se trata de aplicar las propiedades de los polinomios de Hermite en las definiciones básicas de la Mecánica Cuántica.

El símbolo  $\langle \hat{O} \rangle_{nm}$  representará, en todos los casos, el valor esperado de un dado operador  $\hat{O}$  entre los autoestados independientes del tiempo del oscilador armónico caracterizados por los números cuánticos  $n$  y  $m$ . Formalmente

$$\langle \hat{O} \rangle_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_n^*(x) \hat{O} \phi_m(x) \quad (8.4.5)$$

Para el operador posición  $\hat{x}$  el valor esperado  $\langle \hat{x} \rangle_{nm}$  se expresa

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle_{nm} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi_n^*(x) \hat{x} \phi_m(x) \\ &= N_n N_m \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2b_0^2}} H_n\left(\frac{x}{b_0}\right) x e^{-\frac{x^2}{2b_0^2}} H_m\left(\frac{x}{b_0}\right) \end{aligned} \quad (8.4.6)$$

donde hemos escrito, para los factores de normalización

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{b_0 2^n n! \sqrt{\pi}}} \quad (8.4.7)$$

Efectuando el cambio de variables  $x = \rho b_0$ , la integral toma la forma

$$N_n N_m b_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\rho e^{-\rho^2} H_n(\rho) \rho H_m(\rho) \quad (8.4.8)$$

si ahora reemplazamos  $\rho H_m(\rho)$  por

$$\rho H_m(\rho) = \frac{1}{2} H_{m+1}(\rho) + m H_{m-1}(\rho) \quad (8.4.9)$$

obtenemos, para la integral

$$\langle \hat{x} \rangle_{nm} = N_n N_m b_0^2 \left[ \int_{-\infty}^{\infty} d\rho e^{-\rho^2} H_n(\rho) \left( \frac{1}{2} H_{m+1}(\rho) + m H_{m-1}(\rho) \right) \right] \quad (8.4.10)$$

y el resultado final es

$$\langle \hat{x} \rangle_{nm} = N_n N_m b_0^2 \left[ \frac{1}{2} \delta_{n,m+1} + m \delta_{n,m-1} \right] 2^n n! \sqrt{\pi} \quad (8.4.11)$$

de donde, reemplazando los factores de normalización por sus valores e implementando las relaciones entre índices según cada factor  $\delta_{i,j}$  en cada término, resulta

$$\langle \hat{x} \rangle_{nm} = \frac{b_0}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{n+1} \delta_{n,m-1} + \sqrt{n} \delta_{n,m+1} \right]. \quad (8.4.12)$$

Procediendo de manera análoga podemos obtener los siguientes valores esperados

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle_{nm} &= \frac{b_0}{\sqrt{2}} [\sqrt{n+1}\delta_{n,m-1} + \sqrt{n}\delta_{n,m+1}] \\
\langle \hat{x}^2 \rangle_{nm} &= \frac{b_0^2}{2} [\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{n+2,m} + \sqrt{n(n-1)}\delta_{n-2,m} + (2n+1)\delta_{n,m}] \\
\langle \hat{p} \rangle_{nm} &= i\frac{\hbar}{b_0\sqrt{2}} [-\sqrt{n+1}\delta_{n+1,m} + \sqrt{n}\delta_{n-1,m}] \\
\langle \hat{p}^2 \rangle_{nm} &= -\frac{\hbar^2}{2b_0^2} [\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{n+2,m} + \sqrt{n(n-1)}\delta_{n-2,m} - (2n+1)\delta_{n,m}]
\end{aligned} \tag{8.4.13}$$

Con estos elementos podemos ahora escribir la expresión para el valor esperado de un dado operador en la función de onda del oscilador armónico.

$$\begin{aligned}
\langle \hat{O} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(x, t) \hat{O} \phi(x, t) \\
&= \sum_{n,m} a_n^* a_m e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \langle \hat{O} \rangle_{nm}
\end{aligned} \tag{8.4.14}$$

Calcularemos, en primer lugar, el valor esperado del Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle &= \frac{1}{2m} \langle \hat{p}^2 \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle \\
&= \sum_{k,l} a_k^* a_l e^{i(E_k - E_l)t/\hbar} \left[ \frac{1}{2m} \langle \hat{p}^2 \rangle_{kl} + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle_{kl} \right]
\end{aligned} \tag{8.4.15}$$

Utilizando los resultados (8.4.13) para los valores esperados entre auto-estados del oscilador obtenemos

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{k,l} a_k^* a_l e^{i(E_k - E_l)t/\hbar} \left[ \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar^2}{2b_0^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 \left( \frac{b_0^2}{2} \right) \right] (2k+1) \delta_{kl} \tag{8.4.16}$$

Como

$$\frac{\hbar^2}{4mb_0^2} = \frac{m\omega^2 b_0^2}{4} = \frac{\hbar\omega}{4} \tag{8.4.17}$$

reemplazando en la expresión para el valor esperado del Hamiltoniano (8.4.16) llegamos al resultado

$$\begin{aligned}
\langle \hat{H} \rangle &= \sum_k |a_k|^2 (2k+1) \frac{\hbar\omega}{2} \\
&= \sum_k |a_k|^2 E_k
\end{aligned} \tag{8.4.18}$$

Este resultado expresa que:

*El valor esperado del Hamiltoniano es igual a la suma sobre los autoestados ( $k$ ) del producto de la energía ( $E_k$ ) de cada autoestado por el cuadrado del módulo de la amplitud correspondiente a dicho autoestado ( $a_k$ ) en la función de onda,*

y está de acuerdo con el resultado obtenido en el capítulo anterior (Ecuación (7.6.13)).

## 8.5 Desviación del valor medio

La utilización de las expresiones que hemos presentado en la sección anterior, conduce a la siguiente definición de la desviación cuadrática del valor medio del operador posición

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta x^2 \rangle &= \int \phi^*(x, t) (\hat{x} - \langle x \rangle)^2 \phi(x, t) dx \\
 &= \int \phi^*(x, t) \hat{x}^2 \phi(x, t) dx \\
 &+ \langle x \rangle^2 \int \phi^*(x, t) \phi(x, t) dx \\
 &- 2\langle x \rangle \int \phi^*(x, t) \hat{x} \phi(x, t) dx \\
 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2
 \end{aligned} \tag{8.5.1}$$

Análogamente, para el operador momento tenemos

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta p^2 \rangle &= \int \phi^*(x, t) (\hat{p} - \langle p \rangle)^2 \phi(x, t) dx \\
 &= \int \phi^*(x, t) \hat{p}^2 \phi(x, t) dx \\
 &+ \langle p \rangle^2 \int \phi^*(x, t) \phi(x, t) dx \\
 &- 2\langle p \rangle \int \phi^*(x, t) \hat{p} \phi(x, t) dx \\
 &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2
 \end{aligned} \tag{8.5.2}$$

Consideremos, por sencillez del cálculo, que ambas desviaciones se calculan sobre un dado estado del oscilador, cuyo número cuántico es  $n$ , entonces es fácil verificar que

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta x^2 \rangle_n &= (2n + 1) \frac{b_0^2}{2} \\
 \langle \Delta p^2 \rangle_n &= (2n + 1) \frac{\hbar^2}{2b_0^2}
 \end{aligned} \tag{8.5.3}$$

De esta manera, tenemos, para el producto de desviaciones

$$\langle \Delta x^2 \rangle_n \langle \Delta p^2 \rangle_n = \left( \frac{E_n}{\omega} \right)^2 \tag{8.5.4}$$

En definitiva, para cada autoestado del oscilador armónico unidimensional, el producto de las desviaciones de los valores medios del operador posición y del operador momento es una cantidad proporcional a  $\hbar$

$$\Delta x \Delta p_n = \frac{E_n}{\omega} = (n + 1/2) \hbar \tag{8.5.5}$$

Este resultado está de acuerdo con el *principio de incerteza*, cuya primera manifestación fue el carácter no-conmutativo del producto de los operadores posición y momento. Es conveniente destacar que esta indeterminación no es consecuencia de ninguna limitación

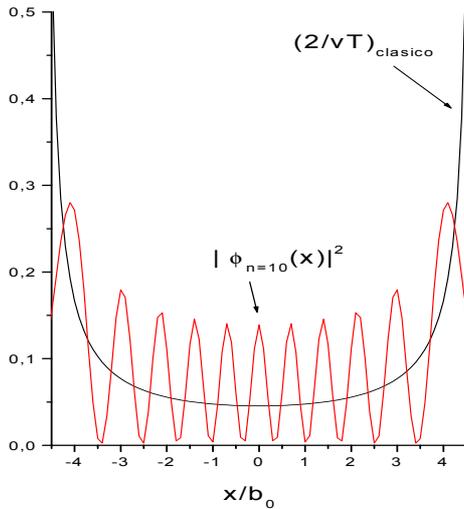


Figura 8.3: Comparación de las probabilidades clásica (línea llena) y cuántica (línea de puntos) para el oscilador armónico en el autoestado con  $n = 10$

de tipo experimental, sino que está dictada por la estructura de los operadores involucrados en el producto, ya que se trata de operadores complementarios, como hemos visto anteriormente.

Finalmente, cabe formular la pregunta respecto a la correspondencia entre valores clásicos y cuánticos, para los observables en el problema del oscilador armónico. Para calcular la probabilidad clásica definiremos, a partir de la expresión de la energía, la cantidad

$$P(x)_{clásica} dx = \frac{2}{Tv} dx \quad (8.5.6)$$

donde  $T$  es el periodo del oscilador y

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}(E - \frac{1}{2}kx^2)}. \quad (8.5.7)$$

La expresión  $P(x)_{clásica} dx$ , (8.5.6), es una medida del tiempo que el oscilador permanece en la posición  $x$ . La ecuación (8.5.7) define los *puntos de retorno* de la trayectoria clásica a partir de los ceros de la velocidad, es decir los puntos donde  $E = V(x_r)$ , con la obvia solución

$$x_r = \pm \sqrt{\frac{2E}{mw^2}} \quad (8.5.8)$$

Para comparar con el caso cuántico, calcularemos la expresión de la velocidad clásica, reemplazando la energía del oscilador por su valor cuántico en función del número cuántico  $n$ . El resultado se muestra en la Figura 8.3. Vemos claramente que a medida que aumentamos el valor de  $n$  los valores clásicos representan muy bien las distribuciones cuánticas. Aunque estas últimas presentan oscilaciones, el número de estas oscilaciones aumenta con  $n$  y el valor clásico representa razonablemente el comportamiento medio de las curvas.

## 8.6 Principio de correspondencia

A partir del ejemplo anterior podemos enunciar el *Principio de Correspondencia*, postulado por Bohr, diciendo que

*Los valores esperados de un dado observable se corresponden con los valores clásicos de la magnitud asociada al operador en el límite de grandes valores de los números cuánticos que caracterizan los estados sobre los que actúa el operador.*

Este principio refleja la importancia del concepto relacionado con la interpretación de la teoría, en conjunción con las reglas propias de la teoría cuántica.

## 8.7 Resumen del capítulo

- *Oscilador armónico unidimensional clásico*
- *Oscilador cuántico*
- *Soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*
- *Polinomios de Hermite y sus propiedades*
- *Valores medios y desviaciones de los valores medios para los operadores  $\hat{x}$  y  $\hat{p}$*
- *Relación de incerteza en el producto  $\Delta x \Delta p$*
- *Principio de correspondencia*

## 8.8 Problemas

1. Calcular, mediante la aplicación del operador diferencial

$$\left( \rho - \frac{d}{d\rho} \right) \quad (8.8.1)$$

las funciones de onda del oscilador armónico unidimensional, con  $n = 0 \rightarrow 10$ .

2. Calcular el factor de normalización para las tres primeras funciones de onda del oscilador armónico.
3. Calcular, por integración de las funciones de onda, los valores esperados del Hamiltoniano en los primeros tres estados del oscilador armónico.
4. Calcular, por integración de las funciones de onda, las dispersiones medias cuadráticas de los operadores de posición y momento, en los tres primeros estados del oscilador armónico.

## Capítulo 9

# POZOS Y BARRERAS DE POTENCIAL

### 9.1 Introducción

En este capítulo nos dedicaremos a estudiar soluciones sencillas de la ecuación de Schrödinger, en sistemas de una dimensión espacial. Consideraremos el caso de potenciales unidimensionales, para estudiar la aparición de *estados ligados*, y algunos ejemplos de *barreras de potencial*, para estudiar el movimiento de partículas bajo condiciones muy diferentes a las que rigen en la Mecánica Clásica.

### 9.2 Pozo cuadrado en una dimensión.

Comenzaremos estudiando el movimiento de una partícula de masa  $m$  en presencia de un potencial de la forma

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 & |x| > a \\ &= -V_0 & |x| < a \end{aligned} \quad (9.2.1)$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se escribe

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \phi(x) = E\phi(x) \quad (9.2.2)$$

Si definimos la función

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))} \quad (9.2.3)$$

la ecuación toma la forma

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2(x) \right] \phi(x) = 0 \quad (9.2.4)$$

Como  $k(x)$  es una función constante a intervalos, ya que  $V(x)$  es una función constante a intervalos, las soluciones de esta ecuación son de tipo oscilatorio ( $\phi \approx e^{\pm ikx}$ ) si  $k$  es real ( $E - V > 0$ ) o de tipo exponencial ( $\phi \approx e^{\pm kx}$ ) si  $k$  es imaginario ( $E - V < 0$ ). Si consideramos energías positivas el movimiento de la partícula, como ocurre en el caso clásico,

no estará limitado a la región de potencial no nulo. Si en cambio consideramos  $E < 0$  la partícula estará confinada en la región donde  $V(x) \neq 0$ , ya que en la región exterior su energía cinética es negativa.

### 9.2.1 Soluciones de energía negativa

Si definimos regiones, para indicar los valores de  $x$  respecto a los puntos  $x = \pm a$ , podemos indicar las correspondientes:  $-\infty < x < -a$  (región *I*),  $-a < x < a$  (región *II*) y  $a < x < \infty$  (región *III*). Si la energía es negativa  $E = -|E|$ , la función  $k(x)$  tomará los valores

$$\begin{aligned} k(x) &= q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)} \quad |x| < a \quad (II) \\ &= i\kappa = i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|} \quad |x| > a \quad (I, III) \end{aligned} \quad (9.2.5)$$

La solución interior (región *II*) satisface la ecuación

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + q^2 \right] \phi(x) = 0 \quad (9.2.6)$$

de manera que la combinación lineal

$$\phi_{II}(x) = A \cos qx + B \sin qx \quad (9.2.7)$$

es una solución aceptable. Para las regiones *I* y *III* (soluciones exteriores) la ecuación de Schrödinger es de la forma

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - \kappa^2 \right] \phi(x) = 0 \quad (9.2.8)$$

y en general, las soluciones se pueden expresar mediante las combinaciones lineales

$$\begin{aligned} \phi_I(x) &= C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x} \\ \phi_{III}(x) &= D' e^{-\kappa x} + C' e^{\kappa x} \end{aligned} \quad (9.2.9)$$

Como las funciones deben ser finitas en  $x = \pm\infty$  las constantes  $C$  y  $C'$  deben anularse, en consecuencia las soluciones aceptables son de la forma:

$$\begin{aligned} \phi_I(x) &= D e^{\kappa x} \\ \phi_{III}(x) &= D' e^{-\kappa x} \end{aligned} \quad (9.2.10)$$

Resumiendo, para cada una de las regiones en las que hemos dividido al eje  $x$  según los valores de  $V(x)$  tenemos:

$$\begin{aligned} \phi_I(x) &= D e^{\kappa x} \\ \phi_{II}(x) &= A \cos qx + B \sin qx \\ \phi_{III}(x) &= D' e^{-\kappa x} \end{aligned} \quad (9.2.11)$$

Para obtener la expresión correspondiente a cada constante debemos imponer las condiciones de continuidad, para las funciones  $\phi_R(x)$  y sus derivadas  $\frac{d}{dx}\phi_R(x)$  (el subíndice  $R$  indica las regiones I,II o III) en los puntos  $x = \pm a$ . Estas condiciones se escriben

$$\begin{aligned}\phi_I(x = -a) &= \phi_{II}(x = -a) \\ \left(\frac{d\phi_I}{dx}\right)_{(x=-a)} &= \left(\frac{d\phi_{II}}{dx}\right)_{(x=-a)} \\ \phi_{II}(x = a) &= \phi_{III}(x = a) \\ \left(\frac{d\phi_{II}}{dx}\right)_{(x=a)} &= \left(\frac{d\phi_{III}}{dx}\right)_{(x=a)}\end{aligned}\quad (9.2.12)$$

de donde resultan las siguientes igualdades

$$\begin{aligned}De^{-\kappa a} &= A \cos qa - B \sin qa \\ \kappa De^{-\kappa a} &= qA \sin qa + qB \cos qa \\ D'e^{-\kappa a} &= A \cos qa + B \sin qa \\ -\kappa D'e^{-\kappa a} &= -qA \sin qa + qB \cos qa\end{aligned}\quad (9.2.13)$$

Eliminando factores comunes, estas ecuaciones se reducen a

$$\begin{aligned}\left(\frac{D}{D'}\right) &= \frac{A \cos qa - B \sin qa}{A \cos qa + B \sin qa} \\ \left(-\frac{D}{D'}\right) &= \frac{Aq \sin qa + qB \cos qa}{-Aq \sin qa + qB \cos qa}\end{aligned}\quad (9.2.14)$$

si igualamos ambas ecuaciones resulta

$$\frac{\alpha A + B}{\alpha A - B} = \frac{A - \alpha B}{A + \alpha B}\quad (9.2.15)$$

donde  $\alpha = \tan qa$ . Si realizamos los productos correspondientes, esta igualdad se transforma en

$$AB(\alpha^2 + 1) = 0\quad (9.2.16)$$

y por lo tanto tendremos soluciones para las siguientes combinaciones de parámetros:  $A = 0, B \neq 0$  (conjunto 1) y  $A \neq 0, B = 0$  (conjunto 2). Las soluciones del conjunto 1 son funciones impares frente al intercambio de  $x$  por  $-x$ , ya que, para  $A = 0, B \neq 0$  resulta  $D = -D'$  y por lo tanto:

$$\begin{aligned}\phi_I(x) &= D e^{\kappa x} \\ \phi_{II}(x) &= B \sin qx \\ \phi_{III}(x) &= -D e^{-\kappa x}\end{aligned}\quad (9.2.17)$$

Si en cambio tomamos la combinación  $A \neq 0, B = 0$  (conjunto 2) resulta  $D = D'$  y las soluciones correspondientes son funciones pares frente al cambio de  $x$  por  $-x$ . En efecto

$$\begin{aligned}\phi_I(x) &= D e^{\kappa x} \\ \phi_{II}(x) &= A \cos qx \\ \phi_{III}(x) &= D e^{-\kappa x}\end{aligned}\quad (9.2.18)$$

Para determinar los valores de las amplitudes  $A(B), D, D'$ , volvemos a escribir las ecuaciones de continuidad (escribiremos solo las condiciones para las funciones impares)

$$\begin{aligned} De^{-\kappa a} &= -B \sin qa \\ \kappa De^{-\kappa a} &= qB \cos qa \end{aligned} \quad (9.2.19)$$

de donde resulta la ecuación

$$\tan qa = -\frac{q}{\kappa} \quad (9.2.20)$$

Esta ecuación, conocida como *ecuación de consistencia*, determina los valores posibles de  $\kappa$  y  $q$ , en función de la energía  $E$  y al mismo tiempo fija el valor de la energía que satisface las condiciones de continuidad. Siguiendo con el caso de las soluciones impares, mostraremos que estos valores están cuantificados. Escribiendo

$$\begin{aligned} \zeta &= qa \\ \eta &= \kappa a \end{aligned} \quad (9.2.21)$$

y reemplazando  $\kappa$  y  $q$  por sus valores, tomando cuadrados y sumando resulta

$$\zeta^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 \quad (9.2.22)$$

por lo tanto, a partir de la ecuación de consistencia

$$\tan \zeta = -\frac{\zeta}{\eta} = -\zeta \left[ \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 - \zeta^2 \right]^{-1/2} \quad (9.2.23)$$

Esta es, nuevamente, una ecuación trascendente. Si graficamos los valores de las funciones

$$\begin{aligned} f_1(\zeta) &= \tan \zeta \\ f_2(\zeta) &= \zeta \left[ \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 - \zeta^2 \right]^{-1/2} \end{aligned} \quad (9.2.24)$$

obtenemos los comportamientos que se muestran en la Figura 9.1. En esa figura hemos tomado el valor  $\zeta_{\text{lmite}}$  como parámetro de corte. Si este valor es menor a  $\pi/2$  no existen estados ligados, es decir: estados para los cuales la identidad  $f_1(\zeta) = -f_2(\zeta)$  se cumple. Si en cambio ese valor está comprendido en el intervalo  $(\pi/2, 3\pi/2)$  existe un estado ligado, que se indica en la figura como la intersección entre ambas funciones, y así siguiendo en los sucesivos intervalos, hasta alcanzar el valor límite para  $\zeta$ . Este es un resultado muy importante, ya que: *sólo pueden obtenerse estados ligados para ciertos valores de la energía* o en otras palabras *la energía de un estado ligado está cuantificada*.

Con los valores de la energía determinados de esta manera, que son los correspondientes a las intersecciones mostradas en la gráfica 9.1 como  $\zeta_1, \zeta_2$ , etc, y como

$$\begin{aligned} \zeta_n &= q(E_n)a \\ &= a \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E_n|)} \end{aligned} \quad (9.2.25)$$

resulta, para la energía, el valor

$$|E_n| = V_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\zeta_n^2}{a^2} \quad (9.2.26)$$

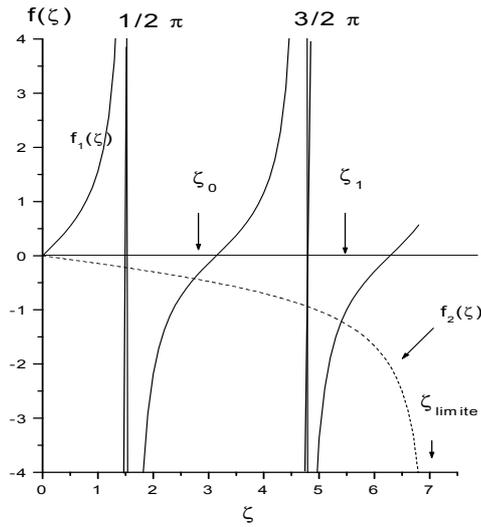


Figura 9.1: Soluciones para el pozo de potencial unidimensional. Los valores  $\zeta_0$  y  $\zeta_1$  son soluciones de la ecuación de consistencia  $f_1(\zeta) = -f_2(\zeta)$ .

Por lo tanto, la energía de los estados *ligados* ( $E < 0$ ) esta cuantificada según la relación

$$E_n = \frac{\hbar^2 \zeta_n^2}{2m a^2} - V_0 \quad (9.2.27)$$

Para cada uno de estos valores; el índice  $n$  indica el autovalor respectivo y está relacionado con el número de nodos (ceros) de la función de onda.

### 9.2.2 Soluciones de energía positiva

En este caso las soluciones en las tres regiones son funciones oscilatorias. Definiendo

$$\begin{aligned} \kappa &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \gamma &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)} \end{aligned} \quad (9.2.28)$$

obtenemos, para las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\begin{aligned} \phi(x < -a) &= Ae^{i\kappa x} + A'e^{-i\kappa x} \\ \phi(-a < x < a) &= Be^{i\gamma x} + B'e^{-i\gamma x} \\ \phi(x > a) &= Ce^{i\kappa x} \end{aligned} \quad (9.2.29)$$

Las soluciones de energía positiva en las regiones exteriores (I, III) e interior (II), poseen diferentes números de ondas y tienden al mismo valor para  $E \gg V_0$ . La situación, para las soluciones de energía positiva del pozo de potencial, es análoga al caso de la propagación de ondas en presencia de barreras de potencial, como veremos en secciones próximas.

### 9.3 Pozo infinito.

En el límite  $V_0 \rightarrow \infty$  (Pozo infinito) la función de onda se anula en la región exterior al potencial. Esto implica:  $\kappa \rightarrow \infty$  y  $q = \sqrt{\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}}$ . Notemos que  $q$  toma valores finitos ya que  $\epsilon = V_0 - |E|$  es la energía medida desde el fondo del pozo de potencial. Aplicando las condiciones de continuidad en los bordes de la zona donde existe el potencial y dado que la única solución posible es la solución interior  $\phi_{II}(x)$

$$\phi_{II}(x) = A \cos qx + B \sin qx \quad (9.3.1)$$

la anulación de la función de onda en  $x = \pm a$  implica que los valores de  $q$  deben ser múltiplos enteros, pares o impares, de  $\frac{\pi}{2a}$ . Si

$$q_n = \frac{\pi}{a} \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9.3.2)$$

las soluciones pares ( $\cos qx$ ) se anularán en  $x = \pm a$ . Si en cambio

$$q_n = \frac{\pi}{a} n \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9.3.3)$$

se anularán las funciones impares ( $\sin qx$ ) en  $x = \pm a$ . Los valores de las energías permitidas resultan entonces

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} q_n^2 \quad (9.3.4)$$

y para el caso de funciones pares los autovalores son

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{a} \left( n + \frac{1}{2} \right) \right)^2 \quad (9.3.5)$$

La estructura de las funciones es

$$\begin{aligned} \phi_n^{par}(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \left( \frac{(n + \frac{1}{2})\pi x}{a} \right) \\ \phi_n^{impar}(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \left( \frac{n\pi x}{a} \right) \end{aligned} \quad (9.3.6)$$

### 9.4 Densidades y corrientes de probabilidad

Discutiremos ahora los conceptos de *densidad de probabilidad* y de *densidad de corriente de probabilidad*. A partir de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo calculamos la diferencia

$$\phi^* H \phi - \phi H \phi^* = i\hbar (\phi^* \partial_t \phi + \phi \partial_t \phi^*) \quad (9.4.1)$$

y reemplazando  $H$  por su valor

$$\begin{aligned} \phi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \phi - \phi \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \phi^* &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\phi^* \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \phi^*) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) \end{aligned} \quad (9.4.2)$$

ya que la suma de términos en  $V$  se anula y la suma de derivadas segundas se reemplaza por la divergencia de los gradientes  $\phi^* \nabla \phi$  y  $\phi \nabla \phi^*$ . Para el término en derivadas temporales se tiene

$$i\hbar(\phi^* \partial_t \phi + \phi \partial_t \phi^*) = i\hbar \partial_t(\phi^* \phi) \quad (9.4.3)$$

e igualando ambas expresiones

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\phi^* \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \phi^*) = i\hbar \partial_t(\phi^* \phi) \quad (9.4.4)$$

Si definimos la densidad de probabilidad

$$\rho = \phi^* \phi \quad (9.4.5)$$

y la densidad de corriente de probabilidad

$$J = \frac{i\hbar}{2m}(\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi) \quad (9.4.6)$$

la igualdad se expresa

$$\nabla \cdot J + \partial_t \rho = 0 \quad (9.4.7)$$

Esta es la *ecuación de continuidad*, denominada de esta manera por su semejanza con la ecuación de continuidad de los fluidos. En este contexto describe la *conservación de la corriente de probabilidad*, ya que si  $H$  es independiente del tiempo  $\partial_t \rho = 0$  y la divergencia de la corriente  $\nabla \cdot J$  se anula. Recordemos que como estamos trabajando en una dimensión espacial  $\nabla = \frac{d}{dx} \hat{i}$  y  $\nabla^2 = \frac{d^2}{dx^2}$ .

En los ejemplos siguientes haremos uso de este resultado.

## 9.5 Barreras de Potencial

La solución del pozo de potencial,  $V < 0$ , muestra la existencia de estados ligados. Las energías de estos estados están determinadas por los valores de  $\zeta$  que son soluciones de las ecuaciones de consistencia. El problema correspondiente a  $V > 0$ , *barrera de potencial* no admite estados ligados, como veremos a continuación, y exhibe el fenómeno de *penetración* que consiste en el movimiento en zonas prohibidas clásicamente.

El potencial es de la forma:  $V = 0$  para  $|x| > a$ , y  $V = V_0$  para  $|x| < a$ . La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo toma la forma

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0\right) \phi(x) &= E\phi(x) & |x| < a \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}\right) \phi(x) &= E\phi(x) & |x| > a \end{aligned} \quad (9.5.1)$$

Clásicamente, si  $E < V_0$  no hay movimiento en el interior de la barrera. Cuánticamente la situación es muy diferente, como veremos a continuación.

En la región exterior

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \kappa^2\right) \phi(x) &= 0 \\ \kappa &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \end{aligned} \quad (9.5.2)$$

y en consecuencia las soluciones son de la forma

$$\phi_I(x) = A e^{i\kappa x} + A' e^{-i\kappa x} \quad x < -a \quad (9.5.3)$$

Esta solución representa la superposición de la onda incidente y la onda reflejada. En la región exterior, a la derecha de la barrera, la solución toma la forma

$$\phi_{III}(x) = C e^{i\kappa x} \quad x > a \quad (9.5.4)$$

En la región *II*, que es la región de localización de la barrera de potencial  $V_0$ , las soluciones serán de tipo oscilatorio si  $E > V_0$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dx^2} + q^2\right)\phi_{II}(x) &= 0 \\ q &= \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \end{aligned} \quad (9.5.5)$$

de donde

$$\phi_{II}(x) = B e^{iqx} + B' e^{-iqx} \quad E > V_0 \quad (9.5.6)$$

o de tipo exponencial si  $E < V_0$

$$\phi_{II}(x) = B e^{-\gamma x} + B' e^{\gamma x} \quad E < V_0 \quad (9.5.7)$$

donde

$$\gamma = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \quad (9.5.8)$$

En ambos casos, la imposición de las condiciones de continuidad de las funciones de onda y de sus derivadas primeras en los puntos  $x = \pm a$ , junto a la condición de normalización, nos permitirá resolver explícitamente los valores de las amplitudes ( $A, A', B, B', C$ ).

### 9.5.1 Solución para el caso $E < V_0$

La imposición de las condiciones de continuidad resulta en el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} A'(e^{i\kappa a}) + B(-e^{\gamma a}) + B'(-e^{-\gamma a}) + C(0) &= A(-e^{-i\kappa a}) \\ A'(-i\kappa e^{i\kappa a}) + B(\gamma e^{\gamma a}) + B'(-\gamma e^{-\gamma a}) + C(0) &= A(-i\kappa e^{-i\kappa a}) \\ A'(0) + B(e^{-\gamma a}) + B'(e^{\gamma a}) + C(-e^{i\kappa a}) &= 0 \\ A'(0) + B(-\gamma e^{-\gamma a}) + B'(\gamma e^{\gamma a}) + C(-i\kappa e^{i\kappa a}) &= 0 \end{aligned} \quad (9.5.9)$$

El determinante de este sistema de ecuaciones tiene el valor

$$\Delta = -4 i\gamma\kappa e^{i2\kappa a} \cosh(2\gamma a) - 2(\kappa^2 - \gamma^2)e^{i2\kappa a} \sinh(2\gamma a) \quad (9.5.10)$$

Utilizando este resultado podemos determinar los valores de las amplitudes  $A'$  (onda reflejada) y  $C$  (onda transmitida).

Las expresiones son las siguientes

$$\begin{aligned}
\frac{C}{A} &= -i \frac{4\kappa\gamma}{\Delta} \\
&= e^{-i2\kappa a} \frac{2\kappa\gamma}{2\gamma\kappa \cosh(2\gamma a) - i(\kappa^2 - \gamma^2) \sinh(2\gamma a)} \\
\frac{A'}{A} &= -\frac{2(\gamma^2 + \kappa^2) \sinh(2\gamma a)}{\Delta} \\
&= -i e^{-i2\kappa a} \frac{(\gamma^2 + \kappa^2) \sinh(2\gamma a)}{2\gamma\kappa \cosh(2\gamma a) - i(\kappa^2 - \gamma^2) \sinh(2\gamma a)} \quad (9.5.11)
\end{aligned}$$

Para cada una de las regiones en las que hemos dividido el intervalo de diferenciación de la función de onda podemos definir las corrientes a cada lado de la barrera

$$\begin{aligned}
j_{\text{incidente}} &= \frac{\hbar\kappa}{m} |A|^2 \\
j_{\text{reflejada}} &= \frac{\hbar\kappa}{m} |A'|^2 \\
j_{\text{transmitida}} &= \frac{\hbar\kappa}{m} |C|^2 \quad (9.5.12)
\end{aligned}$$

En consecuencia, podemos definir los coeficientes

$$\begin{aligned}
T &= \frac{j_{\text{transmitida}}}{j_{\text{transmitida}} + j_{\text{reflejada}}} \\
R &= \frac{j_{\text{reflejada}}}{j_{\text{transmitida}} + j_{\text{reflejada}}} \quad (9.5.13)
\end{aligned}$$

Estos coeficientes, a su vez, se pueden expresar como funciones de las amplitudes, de la manera siguiente

$$\begin{aligned}
T &= \left| \frac{C}{A} \right|^2 \\
&= \frac{1}{1 + f_E \sinh^2(2\gamma a)} \\
R &= \left| \frac{A'}{A} \right|^2 \\
&= \frac{f_E \sinh^2(2\gamma a)}{1 + f_E \sinh^2(2\gamma a)} \\
f_E &= \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \quad (9.5.14)
\end{aligned}$$

La condición de conservación de la probabilidad corresponde a la condición

$$\begin{aligned}
j_{\text{incidente}} &= j_{\text{reflejada}} + j_{\text{transmitida}} \\
1 &= T + R \quad (9.5.15)
\end{aligned}$$

Desde el punto de vista clásico, la densidad de partículas en el interior y a la derecha de la barrera se anulan. Cuánticamente, en cambio, aunque  $E < V_0$  existen densidades no nulas en el interior y exterior de la barrera. Esta es la manifestación del fenómeno de propagación conocido como *efecto túnel*, que permitió, entre otras cosas, explicar la emisión de partículas  $\alpha$  por el núcleo atómico, a energías menores que la correspondiente a la barrera coulombiana nuclear (Efecto Gamow).

### 9.5.2 Solución para el caso $E > V_0$

En este caso, tenemos

$$\begin{aligned}\kappa &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \gamma &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}\end{aligned}\quad (9.5.16)$$

y las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo son de la forma

$$\begin{aligned}\phi(x < -a) &= Ae^{i\kappa x} + A'e^{-i\kappa x} \\ \phi(-a < x < a) &= Be^{i\gamma x} + B'e^{-i\gamma x} \\ \phi(x > a) &= Ce^{i\kappa x}\end{aligned}\quad (9.5.17)$$

Aplicando las condiciones de continuidad de las funciones y sus derivadas primeras en cada punto de discontinuidad del potencial obtenemos el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned}A'(-e^{i\kappa a}) + B(e^{-i\gamma a}) + B'(e^{i\gamma a}) + C(0) &= A(e^{-i\kappa a}) \\ A'(i\kappa e^{i\kappa a}) + B(i\gamma e^{-i\gamma a}) + B'(-i\gamma e^{i\gamma a}) + C(0) &= A(i\kappa e^{-i\kappa a}) \\ A'(0) + B(e^{i\gamma a}) + B'(e^{-i\gamma a}) + C(-e^{i\kappa a}) &= 0 \\ A'(0) + B(i\gamma e^{i\gamma a}) + B'(-i\gamma e^{-i\gamma a}) + C(-i\kappa e^{i\kappa a}) &= 0\end{aligned}\quad (9.5.18)$$

El determinante de este sistema de ecuaciones tiene el valor

$$\Delta = -4\gamma\kappa e^{i2\kappa a} \cos(2\gamma a) + 2i(\kappa^2 + \gamma^2)e^{i2\kappa a} \sin(2\gamma a)\quad (9.5.19)$$

Con este valor, para el coeficiente de transmisión resulta

$$\begin{aligned}\frac{C}{A} &= -e^{-2i\kappa a} \frac{4\kappa\gamma}{\Delta} \\ \left| \frac{C}{A} \right| &= \left[ 1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \sin^2(2\gamma a) \right]^{-1/2}\end{aligned}\quad (9.5.20)$$

En la Figura 9.2 se muestra el comportamiento del coeficiente de transmisión, como función de la energía.

## 9.6 Resumen del capítulo.

- *Pozo unidimensional.*
- *Pozo infinito.*
- *Barreras de Potencial.*
- *Efecto túnel.*
- *Aplicaciones.*

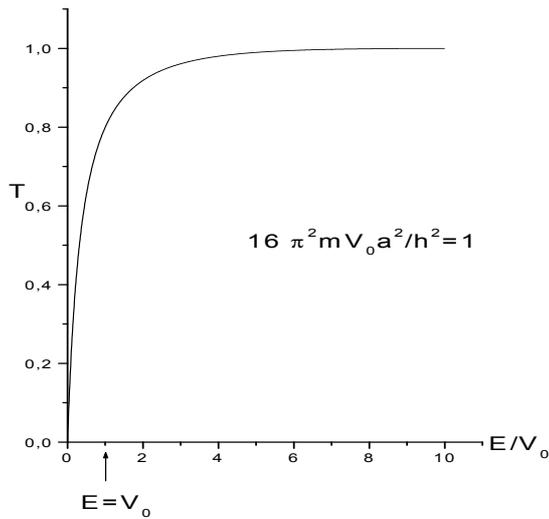


Figura 9.2: Dependencia con la energía del coeficientes de transmisión para una barrera de altura  $V_0$  y ancho  $a_0$

## 9.7 Problemas

1. Problema 1: Estudiar el comportamiento de las soluciones de la ecuación de Schroedinger, independiente del tiempo, correspondiente al potencial

$$\begin{aligned} V(x) &= V_0 > 0 \quad \text{si } -a < x < a \\ &= 0 \quad \text{si } |x| > a \end{aligned} \quad (9.7.1)$$

Considerar el caso  $E \approx V_0$

2. Problema 2: Estudiar, para el caso anterior, el comportamiento del coeficiente de transmisión, en el límite

$$a \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(E - V_0)} \gg 1 \quad (9.7.2)$$

3. Problema 3: Estudiar la propagación de ondas en el potencial

$$V(x) = V_0 e^{-\alpha x} \quad (9.7.3)$$

4. Graficar el espectro de autovalores (9.2.27). Compararlo con el espectro del átomo de Bohr (6.2.14) y con el espectro del oscilador armónico (8.3.28).

## Capítulo 10

# CAMPO CENTRAL

Continuando con la serie de aplicaciones sencillas de los postulados básicos de la Mecánica Cuántica nos dedicaremos, en este capítulo a estudiar el las características básicas de las soluciones de la ecuación de Schrödinger para potenciales centrales, es decir para aquellos potenciales que poseen la simetría

$$V(r) = V(-r). \quad (10.0.1)$$

Para ello tomaremos dos casos representativos de esta simetría: a) el potencial Coulombiano entre cargas puntuales y b) el oscilador armónico en tres dimensiones. Para ello resolveremos la ecuación de Schrödinger, aplicando el método de separación de variables, y estudiaremos la cuantificación del momento angular. Los resultados obtenidos serán comparados con los correspondientes al modelo atómico de Bohr, para el caso del potencial Coulombiano, y con los resultados del Capítulo 8, para el caso del oscilador armónico. Al final del capítulo compararemos las propiedades de las soluciones para ambos potenciales.

### 10.1 Cuantificación del momento angular

A partir de la expresión clásica del momento angular

$$l = r \times p \quad (10.1.1)$$

definiremos el *operador* momento angular reemplazando los vectores posición y momento por los operadores correspondientes

$$\hat{l} = -i\hbar \hat{r} \times \hat{\nabla} \quad (10.1.2)$$

El operador  $\hat{l}$  tiene por componentes

$$\begin{aligned} \hat{l}_x &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{l}_y &= -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{l}_z &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (10.1.3)$$

Las reglas de multiplicación de estos operadores se pueden expresar en términos de los conmutadores

$$\begin{aligned} [\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= i\hbar\hat{l}_z \\ [\hat{l}_x, \hat{l}_z] &= -i\hbar\hat{l}_y \\ [\hat{l}_y, \hat{l}_z] &= i\hbar\hat{l}_x \end{aligned} \quad (10.1.4)$$

Estas expresiones son fácilmente verificables si se reemplaza a los operadores por sus valores, en función de las derivadas, por ejemplo

$$\begin{aligned} \hat{l}_x\hat{l}_y &= -\hbar^2(y\partial_z(z\partial_x) - y\partial_z(x\partial_z) - z\partial_y(z\partial_x) + z\partial_y(x\partial_z)) \\ &= -\hbar^2(y\partial_x + yz\partial_z\partial_x - yx\partial_z\partial_z - z^2\partial_y\partial_x + zx\partial_y\partial_z) \\ \hat{l}_y\hat{l}_x &= -\hbar^2((z\partial_x(y\partial_z) - z\partial_x(z\partial_y) - x\partial_z(y\partial_z) + x\partial_z(z\partial_y)) \\ &= -\hbar^2(zy\partial_x\partial_z - z^2\partial_x\partial_y - xy\partial_z\partial_z + zx\partial_z\partial_y + x\partial_y) \end{aligned} \quad (10.1.5)$$

y la diferencia entre ambas expresiones es

$$\begin{aligned} \hat{l}_x\hat{l}_y - \hat{l}_y\hat{l}_x &= -\hbar^2(y\partial_x - x\partial_y) \\ &= i\hbar(-i\hbar)(x\partial_y - y\partial_x) \\ &= i\hbar\hat{l}_z \end{aligned} \quad (10.1.6)$$

(por sencillez en la notación hemos escrito  $\partial_x = \frac{\partial}{\partial x}$ , etc.). Estas relaciones muestran que las componentes del operador momento angular no conmutan entre sí, de manera que no es posible determinar los valores esperados de cada una de las tres componentes en forma independiente. La determinación de una base de funciones propias del operador momento angular se puede efectuar a partir de la consideración de dos operadores:

a) el operador

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 \quad (10.1.7)$$

que representa el cuadrado del operador momento angular, y

b) el operador  $\hat{l}_z$ .

El operador  $\hat{l}^2$  posee un conjunto completo de funciones propias, los *esféricos armónicos*  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ , que satisfacen la ecuación de autovalores

$$\hat{l}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (10.1.8)$$

donde  $l = 0, 1, 2, \dots$  es el *número cuántico orbital* y  $m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-1, l$  es su *proyección*.

Estas funciones son también autofunciones del operador  $\hat{l}_z$

$$\hat{l}_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (10.1.9)$$

## 10.2 Autofunciones del momento angular

Las funciones  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  forman una base, respecto a las variables angulares, de manera que cualquier función regular de los ángulos,  $f(\theta, \phi)$ , se puede escribir como combinación

lineal de los esféricos armónicos

$$f(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (10.2.1)$$

Los coeficientes  $a_{lm}$  se determinan a partir de las relaciones de ortogonalidad entre esféricos armónicos

$$\begin{aligned} a_{lm} &= \int Y_{lm}^*(\theta, \phi) f(\theta, \phi) d\Omega(\theta, \phi) \\ &= \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} a_{l'm'} \int Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) d\Omega(\theta, \phi) \\ &= \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m'=-l'}^{l'} a_{l'm'} \delta_{ll', mm'} \end{aligned} \quad (10.2.2)$$

ya que

$$\int Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) d\Omega(\theta, \phi) = \delta_{ll', mm'} \quad (10.2.3)$$

En las integrales anteriores hemos utilizado el diferencial de ángulo sólido

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi \quad 0 \leq \theta \leq \pi \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \quad (10.2.4)$$

La forma explícita de las funciones  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  es la siguiente

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = N_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (10.2.5)$$

donde

$$N_{lm} = (-1)^{(m+|m|)/2} \left[ \frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!} \right]^{1/2} \quad (10.2.6)$$

Las funciones

$$P_l^m(x) = \frac{(1-x^2)^{|m|/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} [(x^2-1)^l] \quad (10.2.7)$$

son los polinomios asociados de Legendre. Los valores de los esféricos armónicos, para los primeros valores de  $l$  y  $m$  son los siguientes:

$$\begin{aligned} Y_{00}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{10}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_{1\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ Y_{20}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \\ Y_{2\pm 2}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{15}{128\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \\ Y_{2\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin 2\theta e^{\pm i\phi} \end{aligned} \quad (10.2.8)$$

La conjugación compleja de los esféricos armónicos conduce al resultado

$$\begin{aligned} Y_{lm}^*(\theta, \phi) &= N_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{-im\phi} \\ &= (-1)^m Y_{l-m}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (10.2.9)$$

ya que

$$N_{l-m} = (-1)^m N_{lm} \quad (10.2.10)$$

### 10.3 Transformación de variables

Si escribimos el conjunto de coordenadas cartesianas  $(x, y, z)$  en función de las coordenadas esféricas  $(r, \theta, \phi)$  según

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (10.3.1)$$

las correspondientes derivadas toman la forma

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} &= \sin \theta \cos \phi \frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \cos \theta \cos \phi \frac{d}{d\theta} - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \frac{d}{d\phi} \\ \frac{d}{dy} &= \sin \theta \sin \phi \frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \cos \theta \sin \phi \frac{d}{d\theta} + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \frac{d}{d\phi} \\ \frac{d}{dz} &= \cos \theta \frac{d}{dr} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{d}{d\theta} \end{aligned} \quad (10.3.2)$$

y reemplazando en las expresiones para las componentes cartesianas del momento angular obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{l}_x &= i\hbar \left( \sin \phi \frac{d}{d\theta} + \cos \phi \cot \theta \frac{d}{d\phi} \right) \\ \hat{l}_y &= i\hbar \left( -\cos \phi \frac{d}{d\theta} + \sin \phi \cot \theta \frac{d}{d\phi} \right) \\ \hat{l}_z &= -i\hbar \frac{d}{d\phi} \end{aligned} \quad (10.3.3)$$

Idénticamente, para el cuadrado del operador momento angular la transformación a variables angulares conduce a la forma

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\phi^2} \right] \quad (10.3.4)$$

Si ahora escribimos el operador

$$\nabla^2(x, y, z) = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \quad (10.3.5)$$

en coordenadas esféricas obtenemos:

$$\nabla^2(r, \theta, \phi) = \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\phi^2} \right] \quad (10.3.6)$$

Esta expresión puede entonces re-escribirse utilizando la forma diferencial del operador  $\hat{l}^2$ , de donde

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)\right] + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} \quad (10.3.7)$$

## 10.4 Ecuación de Schrödinger: potencial coulombiano

Utilizando la forma de las derivadas segundas en la representación de coordenadas esféricas podemos escribir el Hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}\right) + V(r) \quad (10.4.1)$$

de la manera siguiente

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)\right] + V(r) + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} \quad (10.4.2)$$

donde  $V(r)$  es el potencial central dependiente de la posición. Podemos resolver ahora la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para esta forma del Hamiltoniano y para el potencial coulombiano entre cargas puntuales

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (10.4.3)$$

Los pasos a seguir son los siguientes:

a) escribiremos para la solución

$$\xi(r, \theta, \phi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (10.4.4)$$

b) aplicaremos el método de separación de variables para determinar la estructura de las funciones radiales  $u(r)$ .

En el punto (a) hemos utilizado ya el hecho de ser la parte angular de la ecuación diferencial directamente proporcional al operador  $\hat{l}^2$ , cuyas autofunciones son los esféricos armónicos  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ .

## 10.5 Separación de variables

Utilizando la forma propuesta para la función de onda  $\xi(r, \theta, \phi)$  y la estructura del Hamiltoniano se obtiene

$$\begin{aligned} H\xi(r, \theta, \phi) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\left(\frac{u(r)}{r}\right)\right)\right] Y_{lm}(\theta, \phi) \\ &+ V(r)\frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \\ &+ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (10.5.1)$$

Si ahora efectuamos las derivadas indicadas resulta:

$$\begin{aligned} H\xi(r, \theta, \phi) &= -\frac{\hbar^2}{2mr} \frac{d^2}{dr^2} u(r) Y_{lm}(\theta, \phi) + V(r) \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \\ &+ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (10.5.2)$$

Si eliminamos la parte angular de la solución, ya que

$$H\xi(r, \theta, \phi) = E \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (10.5.3)$$

el problema se limita a la determinación de la parte radial de  $\xi(r, \theta, \phi)$ .

## 10.6 Soluciones de la ecuación radial

La ecuación para la parte radial se escribe

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left( V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u(r) = E u(r) \quad (10.6.1)$$

o en forma más compacta

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u(r) = 0 \quad (10.6.2)$$

Notemos que el potencial efectivo

$$V_l(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (10.6.3)$$

depende del valor de  $l$ . Si  $V(r)$  es el potencial coulombiano atractivo entre cargas puntuales la suma de la contribución dependiente de  $l$  (o término centrífugo) produce la aparición de un mínimo. La posición del mínimo cambia al cambiar los valores de  $l$ . La condición

$$\begin{aligned} \left[ \frac{dV_l(r)}{dr} \right]_{r=r_{\min}} &= \left[ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^3} \right]_{r=r_{\min}} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (10.6.4)$$

fija la posición del mínimo en el valor

$$r_{\min} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} l(l+1) \quad (10.6.5)$$

y por lo tanto el potencial  $V_l(r)$  en el mínimo tiene el valor

$$V_l(r = r_{\min}) = -\frac{m e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 l(l+1)} \quad (10.6.6)$$

De modo que las características fundamentales del potencial son las siguientes:

- a) diverge para valores de  $r$  cercanos a 0,
- b) posee un mínimo
- c) se anula para valores de  $r \rightarrow \infty$ .

La condición de contorno que debe satisfacer la solución  $u(r)$  en  $r = 0$  es la siguiente

$$u(r = 0) = 0, \quad (10.6.7)$$

y es consecuencia del comportamiento divergente del potencial en ese punto.

## 10.7 Autovalores y autofunciones

Trabajaremos con la función de prueba, no normalizada,

$$u(r) = e^{-\alpha r} r^\beta F(r) \tag{10.7.1}$$

donde  $F(r)$  es el polinomio

$$F(r) = \sum_{k=0}^{k_{\text{mx}}} c_k r^k \tag{10.7.2}$$

cuyo comportamiento está acotado, para  $r \rightarrow \infty$ , por  $e^{\alpha r}$ . Este comportamiento garantiza la validez de la forma propuesta para la función  $u(r)$ . El reemplazo de la forma propuesta para  $u(r)$  en la ecuación diferencial conduce a la ecuación

$$F'' + \left(\frac{2\beta}{r} - 2\alpha\right) F' + \left[\left(\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) + \left(\frac{me^2}{2\pi\epsilon_0} - 2\beta\alpha\right) \frac{1}{r} + \frac{(\beta(\beta-1) - l(l+1))}{r^2}\right] F = 0 \tag{10.7.3}$$

Escribiremos ahora los diferentes términos en potencias de  $r$ , notando que la expresión anterior contiene potencias que varían desde  $r^{-2}$  hasta  $r^{k_{\text{mx}}}$ . La expresión correspondiente es la siguiente

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2}A(-2) + \frac{1}{r}A(-1) + A(0) + rA(1) + \dots \\ + r^q A(q) + \dots + r^{k_{\text{mx}}} A(k_{\text{mx}}) = 0 \end{aligned} \tag{10.7.4}$$

donde

$$\begin{aligned} A(-2) &= c_0(\beta(\beta-1) - l(l+1)) \\ A(-1) &= c_0\left(\frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2} - 2\beta\alpha\right) + c_1(2\beta + \beta(\beta-1) - l(l+1)) \\ A(-0) &= c_0\left(\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) + c_1\left(\frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2} - 2\beta\alpha - 2\alpha\right) \\ &\quad + c_2(\beta(\beta-1) - l(l+1) + 4\beta + 2) \\ A(1) &= c_1\left(\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) + c_2\left(\frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2} - 2\beta\alpha - 2\alpha\right) \\ &\quad + c_3(6 + 6\beta + \beta(\beta-1) - l(l+1)) \\ \dots\dots\dots \\ A(q) &= c_q\left(\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) + c_{q+1}\left(\frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2} - 2\beta\alpha - 2\alpha(q+1)\right) \\ &\quad + c_{q+2}((q+2)(q+1) + 2\beta(q+2) + \beta(\beta-1) - l(l+1)) \\ \dots\dots\dots \\ A(k_{\text{mx}}) &= c_{k_{\text{mx}}}\left(\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) \end{aligned} \tag{10.7.5}$$

La anulación del coeficiente correspondiente a la potencia  $r^{k_{\text{mx}}}$  implica

$$\left(\alpha^2 + \frac{2mE}{\hbar^2}\right) = 0 \tag{10.7.6}$$

que se satisface para  $E < 0$ . La solución al problema de autovalores indica la existencia de estados ligados, como consecuencia de las condiciones impuestas a  $F(r)$ , cuyos valores están dados por la expresión

$$E = -\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} \quad (10.7.7)$$

En el otro extremo de las potencias de  $r$ , el coeficiente del término en  $r^{-2}$  es

$$A(-2) = c_0(\beta(\beta - 1) - l(l + 1)) \quad (10.7.8)$$

y su anulación, para  $c_0 \neq 0$  conduce a la condición

$$\beta(\beta - 1) - l(l + 1) = 0 \quad (10.7.9)$$

de donde resultan dos posibles valores para  $\beta$ , ya que la ecuación de segundo grado

$$\beta^2 - \beta - l(l + 1) = 0 \quad (10.7.10)$$

tiene como soluciones los valores

$$\begin{aligned} \beta_{\pm} &= \frac{1}{2} \left( 1 \pm \sqrt{1 + 4l(l + 1)} \right) \\ &= \frac{1}{2} (1 \pm (2l + 1)) \end{aligned} \quad (10.7.11)$$

y por ende

$$\beta_- = -l \quad (10.7.12)$$

o

$$\beta_+ = (l + 1) \quad (10.7.13)$$

Dado que  $u(r)$  debe anularse para  $r = 0$  el valor  $\beta_-$  debe descartarse y en consecuencia  $\beta_+$  es el valor que debe adoptarse. Si reemplazamos estos valores de  $\beta = \beta(+)$  y  $\alpha$  en la expresión del coeficiente de  $A(q)$  y pedimos su anulación, obtenemos

$$c_{q+1} = c_q \frac{2\alpha}{(q+1)(2l+2+q)} \left( q + l + 1 - \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2\alpha} \right) \quad (10.7.14)$$

Esta relación de recurrencia permite determinar los coeficientes del polinomio  $F(r)$ , a partir del coeficiente  $c_0$ . La condición de corte, impuesta al valor de los coeficientes para  $q \geq k_{\text{mx}}$  conduce, en la relación de recurrencia, al resultado

$$c_{k_{\text{mx}}+1} = 0 \quad (10.7.15)$$

que se cumple si

$$\left( k_{\text{mx}} + l + 1 - \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2\alpha} \right) = 0 \quad (10.7.16)$$

de donde resulta

$$\alpha = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2(k_{\text{mx}} + l + 1)} \quad (10.7.17)$$

definiendo ahora el número entero  $n = k_{\text{mx}} + l + 1$  resulta  $k_{\text{mx}} = n - l - 1$ , lo que implica que los valores de  $l$  para un dado valor de  $n$  no pueden superar el valor  $l_{\text{mx}} = n - 1$ .

En definitiva, las condiciones impuestas al comportamiento de la solución para la parte radial de la función de onda se traducen en los siguientes valores de los parámetros:

$$\begin{aligned}
 \beta &= l + 1 \\
 n &= 1, 2, 3, \dots \\
 0 &\leq l \leq n - 1 \\
 k_{\text{mx}} &= n - l - 1 \\
 \alpha &= \frac{1}{a_0 n} \\
 a_0 &= \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}
 \end{aligned} \tag{10.7.18}$$

y la autofunción radial, no normalizada, toma la forma

$$\begin{aligned}
 u_{nl}(r) &= e^{-r/na_0} r^{l+1} \sum_{k=0}^{n-l-1} c_k(nl) r^k \\
 c_{k+1}(nl) &= c_k(nl) \frac{2(k - k_{\text{mx}})}{(n)(k+1)(2l+k+2)a_0}
 \end{aligned} \tag{10.7.19}$$

Con estos resultados, el problema de autovalores para el campo coulombiano, se expresa mediante las autofunciones y autovalores

$$\begin{aligned}
 \xi_{nl}(r, \theta, \phi) &= N_{nl} e^{-r/na_0} r^l \left( \sum_{k=0}^{n-l-1} c_k(nl) r^k \right) Y_{lm}(\theta, \phi) \\
 E_n &= -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2 n^2}
 \end{aligned} \tag{10.7.20}$$

Notemos que los valores de la energía dependen solamente de  $n$  y no de los valores de  $l$  y  $m$ .

La constante de normalización  $N_{nl}$  se determina mediante el cálculo de la integral

$$\int_0^\infty dr r^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\phi \xi_{nl}^*(r, \theta, \phi) \xi_{nl}(r, \theta, \phi) = 1 \tag{10.7.21}$$

Las funciones normalizadas para  $n = 1$  y  $n = 2$  son:

$$\begin{aligned}
 \xi_{n=1, l=0} &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \\
 \xi_{n=2, l=0} &= \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} e^{-r/2a_0} (1 - r/2a_0) \\
 \xi_{n=2, l=1, m_l} &= \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} e^{-r/2a_0} \frac{r}{a_0} Y_{1m_l}(\theta, \phi)
 \end{aligned} \tag{10.7.22}$$

. Los autovalores respectivos son

$$\begin{aligned}
 E_{n=1, l=0} &= -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \\
 E_{n=2, l=0, 1} &= -\frac{\hbar^2}{8ma_0^2}
 \end{aligned} \tag{10.7.23}$$

Notemos que para  $n = 2$  existen cuatro estados con la misma energía, ya que los autovalores no dependen de los valores de  $l$  correspondientes a un dado valor de  $n$ . El número de estados con la misma energía define la *degeneración*,  $\Omega(n)$ , de los orbitales con  $n$  fijo. Para calcular este valor debemos considerar los valores de  $l$  permitidos para un dado  $n$  y tomar en cuenta que cada uno de esos valores de  $l$  implica la existencia de  $(2l + 1)$  valores de  $m_l$ :

$$\Omega(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 2(n(n-1)/2) + n = n^2 \quad (10.7.24)$$

## 10.8 Comparación con el modelo de Bohr

Si reemplazamos en la expresión de los autovalores  $E_n$ , (10.7.20) la masa  $m$  por la masa reducida  $mM/(m + M)$ , donde  $m$  es la masa del electrón y  $M$  es la masa del protón, y tomamos en cuenta que  $m \ll M$  de manera que  $m \rightarrow m/(1 + (m/M))$  y reemplazamos  $a_0$  por su valor obtenemos

$$E_n = - \left( \frac{m\epsilon^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2} \right) \frac{1}{n^2} \quad (10.8.1)$$

en concordancia con el resultado de Bohr. Naturalmente, utilizando el modelo de Bohr podemos describir solamente el espectro, pero no deja de ser sorprendente el acuerdo que se logra con respecto al tratamiento completo basado en la resolución de la ecuación de Schrödinger. La comparación de ambos tratamientos demuestra de manera dramática el efecto de la discretización del momento angular a la vez que ilustra también de manera dramática el concepto de estado estacionario, introducido por Bohr dos décadas antes de la formulación definitiva de las reglas de la Mecánica Cuántica y de su consolidación como teoría.

Para verificar que el valor obtenido por Bohr, para el autoestado correspondiente a una onda  $s$  ( $l = 0$ ), está de acuerdo con el resultado cuántico, consideremos la función de onda

$$\xi_{n=1,l=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \quad (10.8.2)$$

El valor esperado del Hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (10.8.3)$$

en el estado es igual a

$$\begin{aligned} E_{n=1,l=0} &= \int_0^\infty \xi_{n=1,l=0}^* H \xi_{n=1,l=0} 4\pi r^2 dr \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \xi_{n=1,l=0}^* \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) \right] \xi_{n=1,l=0} 4\pi r^2 dr \\ &\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_0^\infty \xi_{n=1,l=0}^* \left( \frac{1}{r} \right) \xi_{n=1,l=0} 4\pi r^2 dr \end{aligned} \quad (10.8.4)$$

Reemplazando la función de onda por su valor, y efectuando las derivadas indicadas en el primer término del lado derecho de la expresión (10.8.4), resulta:

$$E_{n=1,l=0} = -\frac{2\hbar^2}{m a_0^3} \int_0^\infty e^{-2r/a_0} \left( -\frac{2r}{a_0} + \frac{r^2}{a_0^2} \right) dr$$

$$- \frac{e^2}{\pi\epsilon_0 a_0^2} \int_0^\infty e^{-2r/a_0} \left( \frac{r}{a_0} \right) dr \quad (10.8.5)$$

Las integrales se pueden calcular facilmente efectuando el cambio de variables

$$u = \frac{2r}{a_0} \quad du = \frac{2}{a_0} dr \quad (10.8.6)$$

y teniendo en cuenta que

$$\int_0^\infty e^{-u} u^n = n! \quad (10.8.7)$$

obtenemos

$$E_{n=1,l=0} = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \quad (10.8.8)$$

Finalmente, como

$$\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} = \frac{ma_0}{\hbar^2} \quad (10.8.9)$$

resulta

$$\begin{aligned} E_{n=1,l=0} &= \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} - \frac{\hbar^2}{ma_0^2} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} \end{aligned} \quad (10.8.10)$$

y este es el valor que hemos obtenido al estudiar el modelo atómico de Bohr, ya que al reemplazar  $a_0$  por su valor resulta

$$\begin{aligned} E_{n=1,l=0} &= -\frac{me^4}{32\pi^2\hbar^2\epsilon_0^2} \\ &\approx -13.6 \text{ eV} \end{aligned} \quad (10.8.11)$$

La descripción correcta de los estados estacionarios de un átomo o de una molécula requiere del agregado en el Hamiltoniano de otros términos, además de la interacción coulombiana en el Hamiltoniano.

## 10.9 El oscilador armónico

En esta sección mostraremos la solución correspondiente al movimiento en tres dimensiones espaciales de una partícula de masa  $m$  en el potencial central

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad (10.9.1)$$

siguiendo el procedimiento descrito en las secciones anteriores. En el Capítulo 8 hemos estudiado la solución al problema unidimensional. A continuación estudiaremos el caso en tres dimensiones espaciales, utilizando el método de separación de variables y trabajando con coordenadas esféricas, dado que el potencial posee simetría radial.

## 10.10 Soluciones de la ecuación radial

Como en el caso del campo Coulombiano, la separación de variables en la ecuación de ondas conduce a soluciones de la forma

$$\Psi \approx \frac{u(r)}{r} Y_{lm} \quad (10.10.1)$$

La ecuación para la parte radial se escribe, como en las secciones anteriores,

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) u(r) = 0 \quad (10.10.2)$$

El potencial

$$V_l(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (10.10.3)$$

depende explícitamente de  $l$ . El potencial para  $l = 0$  posee un mínimo en  $r = 0$  y no está acotado para valores grandes de  $r$ ; para  $l \neq 0$  posee un mínimo en

$$r = (l(l+1))^{1/4} b \quad (10.10.4)$$

donde

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (10.10.5)$$

es la longitud característica del oscilador. De modo que el movimiento en la variable radial tiende a confinar o limitar a la función de onda en las regiones interiores del potencial y la posición del centro de confinamiento, que es el valor de  $r$  en el mínimo del potencial, se desplaza a medida que aumentan los valores de  $l$ . Las características fundamentales del potencial son las siguientes:

- a) diverge en  $r = 0$  si  $l \neq 0$ , y se anula en  $r = 0$  solo para  $l = 0$
- b) posee un mínimo en  $r = (l(l+1))^{1/4} b$
- c) tiende a infinito para valores de  $r \rightarrow \infty$ , como  $r^2$ .

En consecuencia, las condiciones de contorno que debe satisfacer la solución  $u(r)$  son las siguientes:

$$u(r = \infty) = 0 \quad (10.10.6)$$

para cualquier valor de  $l$ , y

$$u(r = 0) = 0 \quad (10.10.7)$$

para  $l \neq 0$ .

## 10.11 Autovalores y autofunciones

Trabajaremos con la función de prueba, no normalizada,

$$u(r) = e^{-\alpha r^2} r^{l+1} L(r) \quad (10.11.1)$$

donde  $L(r)$  es el polinomio

$$L(r) = \sum_{k=0}^{k_{\max}} a_{2k} r^{2k} \quad (10.11.2)$$

cuyo comportamiento está acotado, para  $r \rightarrow \infty$ , por  $e^{\alpha r^2}$ . El reemplazo de la forma propuesta para  $u(r)$  en la ecuación diferencial conduce a la ecuación

$$L'' + \left( \frac{2l+1}{r} - 4\alpha r \right) L' + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - 4\alpha \left( l + \frac{3}{2} \right) + 4\alpha^2 r^2 - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 \right) L = 0 \quad (10.11.3)$$

El valor de  $\alpha$  se determina a partir de la igualdad

$$4\alpha^2 r^2 = \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 \quad (10.11.4)$$

que permite eliminar los términos en  $r^2$  que multiplican a  $L(r)$ . En consecuencia

$$\alpha = \frac{m\omega}{2\hbar} = \frac{1}{2b^2} \quad (10.11.5)$$

donde  $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  es el parámetro de escala del oscilador (ver Capítulo 8). Escribiremos ahora los diferentes términos en potencias de  $r$ :

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^{k_{\max}} \left[ a_{2k}(2k)(2k-1)r^{2k-2} \right] \\ & + \sum_{k=1}^{k_{\max}} \left[ a_{2k}(2k) \left( \frac{2(l+1)}{r} - 4\alpha r \right) r^{2k-1} \right] \\ & + \sum_{k=1}^{k_{\max}} \left[ a_{2k}(2k) \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - 4\alpha \left( l + \frac{3}{2} \right) \right) r^{2k-1} \right] = 0 \end{aligned} \quad (10.11.6)$$

y a partir de este desarrollo, la anulación de los coeficientes de las diferentes potencias de  $r$  se escribe

$$\begin{aligned} (r^0) & \rightarrow a_0 \left( \lambda - 4\alpha \left( l + \frac{3}{2} \right) \right) + a_2(4(l+1) + 2) = 0 \\ (r^2) & \rightarrow a_2 \left( \lambda - 4\alpha \left( l + \frac{3}{2} \right) - 8\alpha \right) + a_4(8(l+1) + 12) = 0 \\ (r^4) & \rightarrow a_4 \left( \lambda - 4\alpha \left( l + \frac{3}{2} \right) - 16\alpha \right) + a_6(12(l+1) + 30) = 0 \\ & \dots\dots\dots \\ (r^{2k_{\max}}) & \rightarrow a_{2k_{\max}} \left( \lambda - 4\alpha \left( l + \frac{3}{2} \right) - 8k_{\max}\alpha \right) = 0 \end{aligned} \quad (10.11.7)$$

donde hemos escrito

$$\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (10.11.8)$$

La anulación del coeficiente correspondiente a la potencia  $r^{2k_{\max}}$  implica el valor de corte

$$k_{\max} = \frac{\lambda - 4\alpha \left( l + \frac{3}{2} \right)}{8\alpha} \quad (10.11.9)$$

La existencia de un valor de corte para la serie de potencias de  $r$  es consecuencia, tal como hemos discutido en el caso del campo Coulombiano, de la imposición de condiciones de

contorno para  $u(r)$ . De acuerdo a la forma del potencial,  $L(r)$  está acotada por  $e^{\alpha r^2}$ . A partir del valor de corte  $k_{\text{mx}}$  podemos escribir

$$E = (2k_{\text{mx}} + l + l + \frac{3}{2})\hbar\omega \quad (10.11.10)$$

para  $\alpha = \frac{1}{2b^2}$ . Con este valor de  $\alpha$  la energía  $E$  se expresa en unidades de  $\hbar\omega$ . Si escribimos

$$2k_{\text{mx}} + l = N \quad (10.11.11)$$

resulta

$$E = (N + \frac{3}{2})\hbar\omega \quad (10.11.12)$$

Esta ecuación expresa la discretización de los valores permitidos para la energía. Como  $N$  es necesariamente un número entero, ya que  $l$  y  $k_{\text{mx}}$  lo son, los valores de  $E$  difieren en la cantidad constante

$$\Delta E = \frac{3}{2}\hbar\omega \quad (10.11.13)$$

.

La igualdad

$$2k_{\text{mx}} + l = N \quad (10.11.14)$$

implica

$$2k_{\text{mx}} = N - l \quad (10.11.15)$$

y por lo tanto, como  $2k_{\text{mx}}=0,2,4,\text{etc}$ , los valores de  $l$  están sujetos a la condición

$$\begin{aligned} l &= 0, 2, \dots, N \text{ si } N \text{ es par} \\ l &= 1, 3, \dots, N \text{ si } N \text{ es impar} \end{aligned} \quad (10.11.16)$$

La variación de los valores de  $2k_{\text{mx}}$  con  $l$ , para  $N$  fijo, implica la dependencia efectiva de  $E$  respecto a un único número cuántico,  $N$ .

Retornando al problema de la determinación de los coeficientes del polinomio  $L(r)$ , la relación entre ellos es la siguiente:

$$a_{2k+2} = \frac{\lambda - 4\alpha(l + \frac{3}{2}) - 8k\alpha}{4(l+1)(k+1) - 2(k+1)(2k+1)} a_{2k} \quad (10.11.17)$$

de donde, reemplazando  $k_{\text{mx}}$  su valor resulta:

$$a_{2k+2} = \frac{4\alpha(k_{\text{mx}} - k)}{(k+1)(2l - 2k + 1)} a_{2k} \quad (10.11.18)$$

para  $k = 0, 1, \dots \leq k_{\text{mx}}$ .

## 10.12 Funciones de onda

La función de onda

$$\Psi(r\theta\phi) = A_{Nl} \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (10.12.1)$$

$N$	$l$	$k_{\text{mx}}$	$a_0$	$a_2$	$a_4$
0	0	0	1		
1	1	1	0		
2	0	1	1	$\frac{2}{b^2}$	
2	2	0	1		
3	1	1	1	$\frac{2}{3b^2}$	
3	3	0	1		
4	0	2	1	$\frac{4}{b^2}$	$-\frac{4}{b^4}$
4	2	1	1	$\frac{2}{5b^2}$	
4	4	0	1		

Tabla 10.1: Coeficientes de los polinomios  $L(r) = \sum_{k=0}^{k_{\text{mx}}} a_{2k} r^{2k}$ 

está normalizada de acuerdo a la integral

$$A_{Nl}^2 \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) \int dr u_{Nl}(r)^2 = 1 \quad (10.12.2)$$

La constante de normalización  $A_{nl}$  se determina, en consecuencia, reemplazando  $u_{Nl}(r)$  por su expresión e integrando. El resultado es:

$$\int_0^\infty dr u_{Nl}(r)^2 = \sum_{k,k'=0}^{(N-l)/2} a_{2k} a_{2k'} \int_0^\infty dr r^{2(l+1+k+k')} e^{-r^2/b^2} \quad (10.12.3)$$

La integral radial se puede calcular en forma exacta, ya que mediante el cambio de variables

$$t = r^2/b^2 \rightarrow r = b\sqrt{t} \text{ y } dr = \frac{b}{2\sqrt{t}} dt \quad (10.12.4)$$

se obtiene

$$\int_0^\infty dr r^{2(l+1+k+k')} e^{-r^2/b^2} = \frac{1}{2} b^{2(l+k+k'+3/2)} \int_0^\infty dt e^{-t} t^{l+k+k'+1/2}. \quad (10.12.5)$$

Utilizando la definición de la función  $\Gamma$ , que ya hemos introducido en capítulos anteriores, reemplazamos la integral radial por su valor  $\Gamma(l+k+k'+3/2)$  y finalmente

$$A_{Nl} = \left[ \frac{1}{2} \sum_{k,k'=0}^{(N-l)/2} a_{2k} a_{2k'} b^{2(l+k+k'+3/2)} \Gamma(l+k+k'+3/2) \right]^{-1/2} \quad (10.12.6)$$

La tabla 10.1 muestra la estructura de los polinomios  $L(r)$ , para  $0 \leq N \leq 4$

Como hemos demostrado, el valor de la energía depende solamente del número cuántico principal  $N$ . Como a cada valor de  $N$  se asocia un cierto número de valores de  $l$  y cada valor de  $l$  admite, a su vez,  $\Omega_l = (2l+1)$  valores de la proyección  $m$ , el número total de estados que se asocian a un dado valor de  $N$ , y que por lo tanto poseen la misma energía,

es:

$$\begin{aligned}
 \Omega_N = \sum_l \Omega_l &= \sum_{k=0}^{N/2} (2(2k) + 1) \\
 &= 4 \sum_{k=0}^{N/2} k + \sum_{k=0}^{N/2} 1 \\
 &= 4((N/2)(N/2 + 1))/2 + (N/2 + 1) \\
 &= (1 + N)((N/2) + 1). \tag{10.12.7}
 \end{aligned}$$

Aunque al desarrollar la expresión anterior hemos supuesto que  $N$  es par, el mismo resultado vale para  $N$  impar, si reemplazamos los límites inferiores y superiores de las sumas por  $k = 1$  y  $k = (N + 1)/2$ , respectivamente. En definitiva, para un dado valor de  $N$  la degeneración del espectro está dada por

$$\Omega_N = (N + 1)(N/2 + 1) \tag{10.12.8}$$

y en consecuencia, existen 1, 3, 6, 15, 21, etc estados degenerados para  $N = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \text{etc.}$

## 10.13 Resumen del capítulo

- *Cuantificación del momento angular*
- *Autofunciones del momento angular*
- *Transformación de variables*
- *Potencial coulombiano*
- *Separación de variables*
- *Soluciones de la ecuación radial*
- *Autovalores*

## 10.14 Problemas

1. Graficar las funciones  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ , con  $l = 1$  y  $m_l = 0, \pm 1$ . Graficar también el cuadrado del módulo de estas funciones.
2. Expresar las componentes del gradiente en coordenadas cilíndricas y expresar las componentes de  $\hat{l}$  en esta base.
3. Expresar las componentes del laplaciano  $\nabla^2$  en coordenadas cilíndricas. Aplique el método de separación de variables a este caso.
4. Idem problema anterior, para coordenadas cartesianas  $(x, y, z)$ . Discuta la solución del problema

$$\nabla^2 F(x, y, z) = 0 \quad (10.14.1)$$

en un recinto  $\pm a, \pm b, \pm c$  y considere que la función  $F$  se anula si las coordenadas  $x, y$  o  $z$  toman valores en los extremos del recinto.

5. Comparar gráficamente las funciones de onda radiales y las distribuciones de probabilidad para los primeros autoestados de a) el oscilador armónico y b) el potencial coulombiano.
6. Calcular los valores esperados del operador  $r^2 Y_{20}$  en los autoestados con  $n = 2$  a) del oscilador armónico y b) del potencial coulombiano.

## Capítulo 11

# ESTADÍSTICAS CUÁNTICAS

### 11.1 Introducción

En este capítulo presentaremos los conceptos básicos de las *estadísticas cuánticas*. Comenzaremos discutiendo el concepto de momento angular intrínseco o *spin* y su relación con la simetría o antisimetría de las funciones de onda que representan partículas o sistemas de partículas. Más adelante repasaremos los conceptos de *probabilidad y sumas estadísticas*, ya adelantados en el Capítulo 5 e introduciremos el concepto de *número de ocupación*. Finalmente, presentaremos en forma sencilla las estadísticas cuánticas (Fermi-Dirac, Bose-Einstein, Planck) y discutiremos su relación con las estadísticas clásicas (Maxwell-Boltzmann). El objetivo del capítulo no es dar una versión condensada de la Mecánica Estadística sino explorar de manera sencilla las consecuencias más importantes de la descripción cuántica de sistemas bajo condiciones estadísticas. De este modo el material presentado en este Capítulo se podrá relacionar con el material presentado en el Capítulo 5 (Radiación del cuerpo negro).

### 11.2 El spin

En el capítulo anterior estudiamos el movimiento de partículas en un campo central y la cuantificación del momento angular orbital. A nivel cuántico, las partículas (o sistemas de partículas, como los núcleos, átomos y moléculas) poseen una forma de momento angular, el *momento angular intrínseco o spin*, aún cuando su centro de masa se encuentre en reposo. El *spin* puede tomar valores enteros o semienteros de  $\hbar$ . De acuerdo a los resultados experimentales, ciertas partículas poseen spin semientero y otras poseen spin entero. Los neutrones, protones, electrones, positrones, neutrinos, son ejemplos de partículas con spin  $\frac{1}{2}\hbar$ , los fotones poseen spin  $1\hbar$ , las partículas  $\alpha$  spin 0, etc. La existencia de esta propiedad, el spin, explicó, entre otras cosas, la estructura de la tabla periódica y las características observadas en los espectros atómicos.

La descripción del estado de una partícula, desde el punto de vista cuántico, implica la enumeración de los números cuánticos asociados al estado y *además* la especificación del spin de la misma. Podemos preguntarnos si es posible asignar a dos partículas idénticas el mismo conjunto de números cuánticos. La evidencia experimental indica que dicha asignación está absolutamente prohibida si las partículas en cuestión poseen spin semientero

y está permitida si las partículas poseen spin entero.

Si pensamos que un dado nivel (estado) está caracterizado por el número de ocupación  $n_k$ , entonces puede ocurrir:

- a) que  $n_k$  tome los valores  $n_k = 0, 1, 2, \dots$  sin ninguna restricción,
  - b) que  $n_k$  esté restringido a los valores  $n_k = 0, 1$ ,
- en ambos casos cualquiera sea el valor de  $k$ .

Cuando estemos en presencia de la situación (a) diremos que las partículas son *bosones*; en el caso (b) diremos que se trata de *fermiones*.

La situación (b) es una manifestación del Principio de Exclusión de Pauli y podemos enunciarlo de la manera siguiente: *dos fermiones idénticos no pueden ocupar el mismo estado* y por lo tanto, sus números cuánticos no pueden ser los mismos.

La conexión entre los valores del spin y los números de ocupación es una de las relaciones más importantes de la física, ya que permite establecer que los fermiones poseen spin semientero y los bosones poseen spin entero. En otras palabras: no existe restricción alguna en los números de ocupación asignados a las partículas de spin entero (bosones) y sí existen restricciones (Principio de Exclusión de Pauli) en los números de ocupación asignados a las partículas de spin semientero (fermiones).

## 11.3 Números de ocupación

### 11.3.1 Probabilidades normalizadas

Consideremos el caso de un sistema que puede intercambiar partículas y energía con el baño térmico. El conjunto *sistema+baño térmico* se mantiene aislado y posee un número fijo de partículas  $N$ , una energía fija  $E$  y un volumen dado  $V_0$ . Cada una de las *i-ésimas* situaciones posibles para la configuración *sistema+baño térmico* se puede caracterizar por el número de partículas  $N_i$  y la energía  $E_i(N_i)$  del sistema, que mantiene su volumen fijo  $V$ . Cuando esto ocurre, el baño térmico posee  $N - N_i$  partículas, su energía es  $E - E_i(N_i)$  y su volumen es  $V_0 - V$ . De manera que, de acuerdo al postulado de *igualdad de probabilidades a priori* (esto significa que no existe una partición o configuración preferida para el sistema) la probabilidad de encontrar al sistema en la configuración *i-ésima* resulta

$$p_i \approx \exp[S(E - E_i(N_i), V_0 - V, N - N_i)]/k \quad (11.3.1)$$

La función  $S$  representa la entropía del baño térmico y se expresa en unidades de la constante de Boltzmann  $k$ .

La descripción estadística está basada en la diferenciación de las escalas de evolución del baño térmico y del sistema. Supondremos que el baño térmico evoluciona muy lentamente con respecto a los cambios del sistema. También supondremos que el sistema *evoluciona* ocupando cada uno de sus estados accesibles  $(E_i(N_i), N_i)$  intercambiando energía y partículas con el baño térmico sin alterarlo. La justificación de esta suposición es muy simple y se basa en considerar que el baño térmico posee un número de grados de libertad muchísimo más grande que el número de grados de libertad del sistema. En otras palabras, las diferencias  $E - E_i(N_i)$ ,  $N - N_i$ ,  $V_0 - V$  serán siempre arbitrariamente pequeñas en la descripción de los estados del baño térmico, permaneciendo este arbitrariamente cerca

de su valor *de equilibrio* determinado por los valores  $E, N, V_0$ . El sistema, en cambio, evolucionará entre todos sus estados accesibles bajo las condiciones externamente fijadas por el baño térmico. Estas condiciones externas se representan mediante parámetros tales como la temperatura ( $T$ ) y el potencial químico, que no dependen del tamaño del sistema sino exclusivamente del estado de equilibrio definido por el baño térmico. Para determinar los valores de estos parámetros efectuaremos una expansión alrededor del valor fijo  $S(E, N, V)$ . Reteniendo las primeras derivadas en la expansión de Taylor del exponente en (11.3.1) resulta:

$$S(E - E_i(N_i), V_0 - V, N - N_i) \approx S(E, N, V_0) - \frac{\partial S}{\partial E} E_i(N_i) - \frac{\partial S}{\partial N} N_i - \frac{\partial S}{\partial V_0} V \quad (11.3.2)$$

A partir de la expresión (11.3.2) podemos definir la temperatura  $T$  y el potencial químico  $\mu$  del baño térmico mediante

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} &= \frac{\partial S}{\partial E} \\ \mu &= -T \frac{\partial S}{\partial N}, \end{aligned} \quad (11.3.3)$$

y con (11.3.3) escribir en (11.3.2)

$$S(E - E_i(N_i), V_0 - V, N - N_i) \approx S(E, N, V_0) - \frac{E}{T} + \frac{\mu N}{T} - \frac{\partial S}{\partial V_0} V, \quad (11.3.4)$$

Estas cantidades son *conjugadas* a la energía y al número de partículas, como podemos apreciar en la ecuación siguiente, que se obtiene a partir de (11.3.1) con los reemplazos dados por (11.3.3):

$$p_i \approx \exp[-\beta(E_i(N_i) - \mu N_i)], \quad (11.3.5)$$

donde  $\beta = \frac{1}{kT}$ , ya que en (11.3.1) la entropía  $S$  está expresada en unidades de la constante de Boltzmann. Como hemos indicado en el Capítulo 5, sección 6, la cantidad  $\beta$  posee unidades de  $[energía]^{-1}$  y el factor  $\beta\mu$  es adimensional, ya que  $\mu$  posee unidades de energía. La normalización de  $p_i$  en (11.3.5) se consigue mediante la suma

$$Z(\beta, \mu, V_0) = \sum_{N_i=0}^{\infty} \exp[-\beta(E_i(N_i) - \mu N_i)] \quad (11.3.6)$$

Notemos que (11.3.6) no depende de  $N$  ni de  $E$ , sino de  $\beta$  y  $\mu$ . La suma en (11.3.6) debe interpretarse como una suma en el número de partículas  $N_i$  y en todos los valores de la energía  $E_i(N_i)$  compatibles con  $N_i$ .

### 11.3.2 Sumas estadísticas y números de ocupación

Las probabilidades

$$p_i = \frac{\exp[-\beta(E_i(N_i) - \mu N_i)]}{Z} \quad (11.3.7)$$

están normalizadas y la suma de estos valores es la unidad:

$$\sum_i p_i = 1 \quad (11.3.8)$$

Supongamos que el sistema que estamos describiendo posee estados o niveles de energía  $E_k$  y que en cada uno de esos niveles podemos acomodar  $0, 1, ..n_k$  partículas. El conjunto de estados permitidos para el sistema con  $N_i$  partículas se puede describir mediante los *números de ocupación*  $n_1(i), n_2(i), \dots, n_j(i), \dots$ , correspondientes a la  $i$ -ésima configuración, tales que

$$\begin{aligned} N_i &= \sum_k n_k(i) \\ E_i(N_i) &= \sum_k n_k(i)E_k \end{aligned} \quad (11.3.9)$$

Los valores de los números de ocupación  $n_k(i)$  pueden estar sujetos a restricciones de acuerdo a la descripción clásica o cuántica que utilicemos para estudiar el sistema, como veremos a continuación.

### 11.3.3 Números de ocupación: Fermiones

Para el caso de fermiones, cada número de ocupación  $n_k(i)$  puede tomar los valores

$$n_k(i) = 0, 1 \quad (11.3.10)$$

de acuerdo al Principio de Exclusión de Pauli y por lo tanto, la función (11.3.6) se escribe (utilizaremos el sub-índice  $f$  para indicar que estamos trabajando con fermiones):

$$\begin{aligned} Z_f &= \sum_{n_1, n_2, \dots, n_j, \dots} \exp[-\beta(n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots + n_j E_j + \dots - \mu(n_1 + n_2 + \dots + n_j + \dots))] \\ &= \sum_{n_1=0,1} \exp[-\beta(n_1 E_1 - \mu n_1)] \sum_{n_2=0,1} \exp[-\beta(n_2 E_2 - \mu n_2)] \dots \sum_{n_j=0,1} \exp[-\beta(n_j E_j - \mu n_j)] \dots \\ &= (1 + \exp[-\beta(E_1 - \mu)])(1 + \exp[-\beta(E_2 - \mu)]) \dots (1 + \exp[-\beta(E_j - \mu)]) \dots \\ &= \prod_j (1 + \exp[-\beta(E_j - \mu)]). \end{aligned} \quad (11.3.11)$$

Para efectuar el cálculo de (11.3.11) a partir de (11.3.6) hemos reemplazado la suma sobre configuraciones  $(n_1, n_2, ..n_j, ..)$  sujetas a las restricciones (11.3.9) por sumas sobre los números de ocupación  $n_j$  para cada estado o nivel de energía. La última línea de (11.3.11) se obtiene reemplazando  $n_j$  por los valores posibles  $n_j = 0, 1$ . Si tomamos el logaritmo del producto (11.3.11) obtenemos

$$\ln Z_f = \sum_j \ln(1 + \exp[-\beta(E_j - \mu)]). \quad (11.3.12)$$

La operación

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_f}{\partial \mu} &= \sum_j \frac{1}{\exp[\beta(E_j - \mu)] + 1} \\ &= \sum_j \bar{n}_j \end{aligned} \quad (11.3.13)$$

define los números medios de ocupación para fermiones

$$\bar{n}_j = \frac{1}{\exp[\beta(E_j - \mu)] + 1} \quad (11.3.14)$$

Notemos que mientras  $n_j = 0, 1$ , de acuerdo al Principio de Exclusión de Pauli, los números de ocupación medios (11.3.14) varían en forma continua entre 0 y 1. En el límite  $T \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}\bar{n}_j(T=0) &= 1 \quad \text{si } E_j < \mu \\ &= 0 \quad \text{si } E_j > \mu\end{aligned}\quad (11.3.15)$$

y

$$\bar{n}_j(T, E_j = \mu) = \frac{1}{2} \quad (11.3.16)$$

Los números de ocupación medios (11.3.14) definen la estadística de Fermi-Dirac o estadística de fermiones. De acuerdo con los postulados que hemos presentado anteriormente los números de ocupación medios respetan la condición

$$\sum_j \bar{n}_j = N \quad (11.3.17)$$

y esta ecuación es la que determina el valor de  $\mu$  para cada temperatura  $T$ .

#### 11.3.4 Números de ocupación: Bosones

Para el caso de bosones, cada número de ocupación  $n_k(i)$  puede tomar los valores

$$n_k(i) = 0, 1, 2, \dots, N \quad (11.3.18)$$

dado que no hay restricciones sobre ellos por tratarse de los números de ocupación de estados de spin entero. Por lo tanto, la función (11.3.6) se escribe (utilizaremos el subíndice  $b$  para indicar que estamos trabajando con bosones):

$$\begin{aligned}Z_b &= \sum_{n_1, n_2, \dots, n_j, \dots} \exp[-\beta(n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots + n_j E_j + \dots - \mu(n_1 + n_2 + \dots + n_j + \dots))] \\ &= \sum_{n_1=0,1,2,\dots} \exp[-\beta(n_1 E_1 - \mu n_1)] \sum_{n_2=0,1,2,\dots} \exp[-\beta(n_2 E_2 - \mu n_2)] \dots \\ &= \frac{1}{1 - \exp[-\beta(E_1 - \mu)]} \cdot \frac{1}{1 - \exp[-\beta(E_2 - \mu)]} \dots \frac{1}{1 - \exp[-\beta(E_j - \mu)]} \dots \\ &= \prod_j \frac{1}{(1 - \exp[-\beta(E_j - \mu)])}.\end{aligned}\quad (11.3.19)$$

Notemos que para efectuar el cálculo de (11.3.19) a partir de (11.3.6) hemos reemplazado la suma sobre configuraciones  $(n_1, n_2, \dots, n_j, \dots)$  sujetas a las restricciones (11.3.9) por sumas sobre los números de ocupación  $n_j$  para cada estado o nivel de energía, repitiendo el procedimiento utilizado para el caso de fermiones, pero a diferencia de (11.3.11), que sólo suma dos términos para cada nivel  $j$ , en (11.3.19) obtenemos una suma geométrica de razón  $\exp[-\beta(E_j - \mu)]$  para cada nivel  $j$ . La última línea de (11.3.19) se obtiene reemplazando las sumas geométricas por sus expresiones, considerando  $N$  suficientemente grande como para despreciar el valor del último término de cada serie geométrica en el resultado final. Si tomamos el logaritmo del producto (11.3.19) obtenemos

$$\ln Z_b = - \sum_j \ln(1 - \exp[-\beta(E_j - \mu)]). \quad (11.3.20)$$

La operación

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z_b}{\partial \mu} &= \sum_j \frac{1}{\exp[\beta(E_j - \mu)] - 1} \\ &= \sum_j \bar{n}_j, \end{aligned} \quad (11.3.21)$$

define los números medios de ocupación para bosones

$$\bar{n}_j = \frac{1}{\exp[\beta(E_j - \mu)] - 1}. \quad (11.3.22)$$

En el límite  $T \rightarrow 0$  y para un sistema como el que estamos estudiando con un número fijo de partículas, el estado de energía más baja debe estar completamente ocupado y  $\mu$  debe tomar valores negativos respecto a ese nivel. Esta condición impide que la suma de números de ocupación medios (11.3.22) se torne indeterminada (es decir que tienda a infinito) ya que su valor debe ser igual al número de partículas para todo  $T$ . La tendencia a ocupar exclusivamente el estado de energía más baja, por debajo de cierta temperatura, es conocida como *la condensación de Bose-Einstein*. No se trata de una condensación en el espacio ordinario sino en el espacio de momentos. A medida que  $T \rightarrow 0$  el estado de momento cero (energía más baja posible), domina en la suma (11.3.20). Esta es una diferencia fundamental en el comportamiento de los bosones respecto al comportamiento de los fermiones en el límite  $T \rightarrow 0$ , ya que (11.3.17) toma valores finitos aún si  $T = 0$  y la ocupación de niveles a  $T = 0$  no está restringida al estado de energía más baja. La estadística definida con los números de ocupación (11.3.22) es la estadística de Bose-Einstein o estadística de bosones. Se aplica al caso de sistemas con un número fijo de partículas de spin entero.

### 11.3.5 Números de ocupación: Fotones

La estadística de Planck es un caso particular de la estadística de Bose-Einstein. El fotón posee spin igual a  $1\hbar$  y su masa en reposo es nula. El número de fotones en un sistema está siempre indeterminado y la energía de un fotón de frecuencia  $\nu_k$  está dada por  $E_k = h\nu_k$ . Los números de ocupación  $n_k$  toman los valores

$$n_k(i) = 0, 1, \dots, \infty \quad (11.3.23)$$

Al efectuar la suma en (11.3.6) trabajaremos con el valor  $\mu = 0$  en (11.3.6), eliminando la restricción referida al número de partículas, obteniendo

$$\begin{aligned} Z_{fotn}(\nu_k) &= \sum_{n_k=0}^{\infty} \exp[-\beta n_k h\nu_k] \\ &= \frac{1}{1 - \exp[-\beta h\nu_k]}. \end{aligned} \quad (11.3.24)$$

Por lo tanto, considerando el espectro completo de frecuencias

$$\begin{aligned} Z_{fotn} &= \prod_k Z_{fotn}(\nu_k) \\ &= \prod_k \frac{1}{1 - \exp[-\beta h\nu_k]}, \end{aligned} \quad (11.3.25)$$

y en consecuencia

$$\ln Z_{fotn} = - \sum_k \ln (1 - \exp [-\beta h \nu_k]). \quad (11.3.26)$$

De manera que, efectivamente, (11.3.26), es de la forma (11.3.20) con  $\mu = 0$ . Análogamente

$$\bar{n}_j = \frac{1}{\exp [\beta h \nu_j] - 1}. \quad (11.3.27)$$

es el número de ocupación medio para fotones de frecuencia  $\nu_j$ . La ausencia del potencial químico  $\mu$  (11.3.27) elimina la posibilidad de encontrar el fenómeno de condensación de Bose-Einstein en un gas de fotones. En el Capítulo 5 hemos descrito el cálculo de valores medios, en un gas de fotones, considerando una variación continua de la frecuencia  $\nu_k$ , partiendo de (11.3.27).

## 11.4 Estadísticas cuánticas y límites clásicos

La estructura de los números de ocupación medios, en las estadísticas cuánticas es de la forma

$$\bar{n}_k = \frac{1}{\exp [\beta(E_k - \mu)] \pm 1} \quad (11.4.1)$$

El signo  $+$  en el denominador corresponde a la estadística de Fermi-Dirac y el signo  $-$  a la estadística de Bose-Einstein (con  $\mu \neq 0$ ) y a la estadística de Plank (fotones) si  $\mu = 0$ .

En el límite clásico, los números de ocupación medios deben ser suficientemente pequeños, dado que el número de estados accesibles es macroscópico, para garantizar un número grande pero finito de partículas ( $N \approx 10^{24}$ ). En otras palabras, debemos pedir

$$\bar{n}_k \ll 1 \quad (11.4.2)$$

La condición (11.4.2) se satisface si en (11.4.1) pedimos

$$\exp [\beta(E_k - \mu)] \gg 1 \quad (11.4.3)$$

y en consecuencia

$$\bar{n}_k = \exp [-\beta(E_k - \mu)] \quad (11.4.4)$$

que es precisamente el valor correspondiente a la estadística de Maxwell-Boltzmann. De manera que *las estadísticas cuánticas tienen como límite clásico la estadística de Maxwell-Boltzmann*. A partir de (11.4.4) podemos fijar el valor de  $\mu$  pidiendo que el número medio de partículas en el gas resulte de la suma de los números de ocupación medios (11.4.4):

$$\begin{aligned} N &= \sum_k \exp [-\beta(E_k - \mu)] \\ &= \exp [\beta\mu] \sum_k \exp [-\beta E_k] \\ &= \exp [\beta\mu] Z \end{aligned} \quad (11.4.5)$$

donde

$$Z = \sum_k \exp [-\beta E_k] \quad (11.4.6)$$

en completo acuerdo con las expresiones del Capítulo 5.

## 11.5 Resumen del capítulo

- *Spin*
- *Spin y Estadística*
- *Fermiones y bosones*
- *Números de ocupación*
- *Estadísticas cuánticas y límites clásicos*

## 11.6 Problemas

1. Describa el experimento de Stern y Gerlach.
2. Describa y discuta el efecto Zeeman.
3. Investigue acerca de la relación existente entre el Principio de Exclusión de Pauli y el ordenamiento de valencias electrónicas en la Tabla Periódica.
4. Discuta, a partir de gráficos, las diferencias existentes en entre los números de ocupación medios para las estadísticas de Fermi-Dirac, Bose-Einstein y Planck.
5. Utilizando la estadística de Fermi-Dirac calcule el valor de la suma

$$\sum_k e_k \bar{n}_k \quad (11.6.1)$$

en el límite  $T=0$ . Considere un sistema equi-espaciado de energías  $e_k$ ,  $N$  partículas, y una degeneración de dos partículas por cada nivel  $e_k$ .

6. Utilizando la estadística de Bose-Einstein, discuta el fenómeno de condensación, en un sistema de dos niveles de energía, separados por una distancia  $E_1 - E_0 = \Delta$ .
7. Considere un sistema de dos niveles de energía,  $E_1$  y  $E_2$ . Si cada uno de esos niveles puede acomodar a dos partículas construya la tabla de ocupaciones considerando las siguientes posibilidades:
  - a) las partículas son fermiones,
  - b) las partículas son bosones,
  - c) las partículas son clásicas y distinguibles,
  - d) las partículas son clásicas y indistinguibles.

# Capítulo 12

## BIBLIOGRAFIA

A continuación presentaremos la lista de textos que hemos adoptado como textos de referencia al escribir el presente libro. En nuestra opinión, estos textos son los que mejor se adaptan a posteriores lecturas y a consultas por parte de los estudiantes, tanto para el curso introductorio que hemos diseñado como para cursos posteriores de Mecánica Cuántica, Mecánica Estadística y Relatividad. También se indican algunos textos de divulgación, biográficos y de historia de la física moderna. Es recomendable que los estudiantes visiten sitios de la web que están específicamente dedicados a la presentación de resultados, experimentos, notas biográficas y aplicaciones varias relacionados con los conceptos que hemos presentado en este libro.

### 12.1 Libros de Texto

1. *Introducing Einstein's Relativity*, R.D'Inverno, Clarendon Press-Oxford, (1992)

Este libro ha sido la obra de consulta para diseñar los Capítulos 1-4, dedicados a la presentación de la Teoría de la Relatividad Especial. De este texto hemos adoptado la discusión basada en las representaciones espacio-temporales de Bondi. Resulta especialmente atractivo por el uso de conceptos puramente geométricos. Contiene los conceptos esenciales para una presentación rigurosa de la Teoría de la Relatividad, ya que el material presentado por el autor incluye el desarrollo de los conceptos y aplicaciones de la Teoría General de la Relatividad.

2. *Quantum Mechanics: A modern Introduction*, D.R.Bes, Springer (Berlin) 2004.

Hemos utilizado este libro para presentar los aspectos formales de la introducción a la Mecánica Cuántica, en el Capítulo 7. Es un libro de texto muy adecuado para el dictado de un curso regular de Mecánica Cuántica y en él los conceptos se presentan en forma concisa, rigurosa y moderna. Contiene elementos que facilitan la comprensión de la evolución de las ideas en la Mecánica Cuántica. La lista de referencias constituye una importante fuente de información para el estudiante.

3. *Introductory Quantum mechanics*, F. Mandl, Oxford (2000)

Se trata de un texto muy accesible para estudiantes que no han tomado aún cursos de matemáticas avanzadas. Presenta los conceptos en forma clara y directa, mediante el uso de ejercicios de aplicación. Su lectura complementa el material que hemos presentado en los Capítulos 8-10, dedicados a las aplicaciones sencillas de la Mecánica Cuántica.

4. Quantum Mechanics, B. H. Bransden, C. J. Joachain, Prentice Hall (2000) Manchester, England

Es un libro de nivel adecuado a un curso regular de Mecánica Cuántica para estudiantes de graduación. Sigue una presentación más tradicional que las obras que hemos citado anteriormente. Su lectura puede ser utilizada para ilustrar con mayor detalle el material que hemos presentado en el Capítulo dedicado a problemas de Mecánica Cuántica en una dimensión espacial.

5. Statistical Physics, F. Mandl, John Wiley and sons (1988)

Cubre aspectos básicos de la termodinámica estadística y es ciertamente accesible para los estudiantes que han completado el ciclo de la física general. Establece claramente y con sencillez los postulados básicos de la Mecánica Estadística, en un nivel introductorio. Complementa el material presentado en los Capítulos 5 y 11 relacionados con los elementos básicos de la Mecánica Estadística.

6. The Feynman Lectures on Physics. Vol. 3, R. P. Feynman, R. D. Leighton, M. Sands. Reading, Mass. (1965)

Se trata de un texto que cubre, de manera elegante y rigurosa, las cuestiones relacionadas con los conceptos básicos aplicables al estudio de sistemas atómicos y moleculares. El texto tiene la capacidad de captar la atención del estudiante mediante la formulación de ejemplos y la discusión de modelos y sus soluciones.

Profesor Titular Ordinario (Ded. Excl.) de la UNLP, Investigador Superior del CONICET.

Dr en Física (UNLP, 1974), becario de postgrado en el Niels Bohr Institute, Copenhagen (Dinamarca, 1975-1978), becario de las Fundaciones: Alexander von Humboldt (Alemania, 1978-1979 y 1982-1983) y J.S.Guggeheim (USA, 1997). Investigador visitante en varias oportunidades en las Universidades de Sao Paulo (Brasil), Iowa (USA), Notre Dame (USA), Estocolmo (Suecia), UNAM (Mexico), Jyvaskyla (Finlandia) y en los Institutos CALTECH (USA), CINVESTAV(Mexico), INT (Seattle).

Profesor visitante en la Universidad de Tübingen (Alemania, 1990-1991) y en la Universidad de Jyvaskyla (Finlandia, 1998), Profesor de Excelencia (Universidad de Osaka, Japon, 1998), Miembro Asociado Senior del ICTP (Trieste), Miembro Asociado-Representante del ECT\* (Trento), Afiliado al INT (Seattle), Corresponsal de la NUPECC (CERN).

Dictó cursos en el ICTP (Trieste, 1988), en la Escuela de Física de los Países Nórdicos (1998), en el CINVESTAV (1994) y en la Universidad de Jyvaskyla (1996,1997).

Recibió los Premios Fundación Coca Cola (1984), B. Houssay (SECYT, 1986), B. Houssay (SECYT, 2003), G. Beck (Ac.Nac. de Cs. Exactas, Físicas y Naturales, 2004), Fundacion KONEX 2014 (premio: Personalidad destacada de la década). Es miembro de la Academia Mexicana de Ciencias.

Fue miembro de la CD de la AFA, Jefe del Depto de Física de la Fac.de C.Exactas de la UNLP, de comisiones asesoras de la CICPBA del CONICET y de la ULNP.

Autor de 230 trabajos en revistas internacionales con arbitraje, 42 contribuciones a conferencias internacionales con arbitraje, 5 capítulos en libros. Índice h=34.

Dirigió 17 trabajos de Diploma y 14 Tesis Doctorales.

Miembro de colaboraciones nacionales (Tandar-CNEA) e internacionales (Univ. de Valladolid y Burgos (España), Univ. de Jyväskylä (Finlandia), Univ. de Osaka (Japon)).

Temas de investigación: Física Nuclear Teórica, Interacciones Electrodébiles en Núcleos, Física de Neutrinos.

Civitarese, Osvaldo

Elementos de física moderna / Osvaldo Civitarese. - 1a ed . - La Plata: Universidad Nacional de La Plata, 2017.

Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online

ISBN 978-950-34-1571-9

1. Átomo. 2. Mecánica de las Ondas. I. Título.  
CDD 530

Diseño de tapa: Dirección de Comunicación Visual de la UNLP

Universidad Nacional de La Plata – Editorial de la Universidad de La Plata

47 N.º 380 / La Plata B1900AJP / Buenos Aires, Argentina

+54 221 427 3992 / 427 4898

edulp.editorial@gmail.com

www.editorial.unlp.edu.ar

Edulp integra la Red de Editoriales Universitarias Nacionales (REUN)

Primera edición, 2015

ISBN 978-950-34-1245-9

© 2015 - Edulp

**e**  
**exactas**

  
Editorial  
de la Universidad  
de La Plata



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA