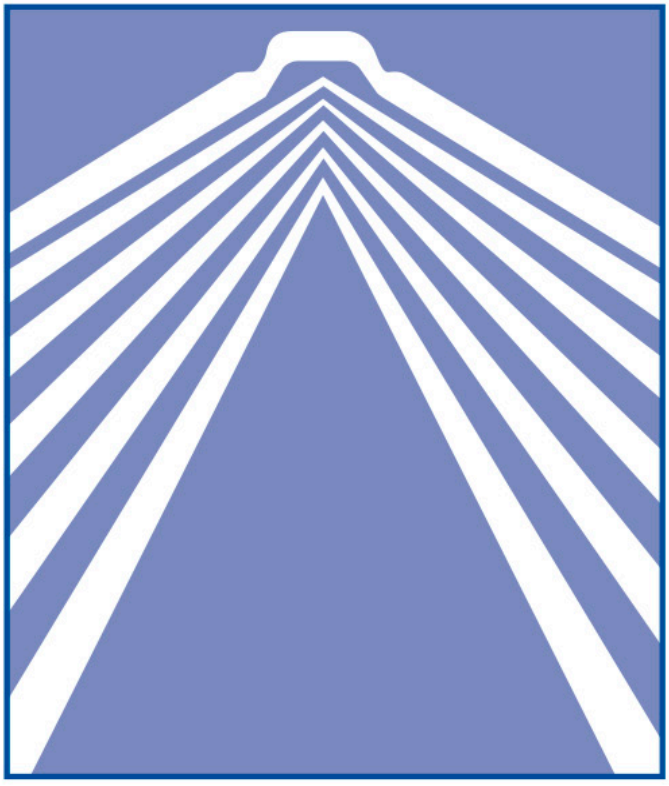
5.ª edición

FÍSICA CUÁNTICA



Carlos Sánchez del Río
(Coord.)

PIRÁMIDE

5.ª edición

FÍSICA CUÁNTICA

Coordinador
CARLOS SÁNCHEZ DEL RÍO
PROFESOR EMÉRITO. FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
DE LA UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

5.ª edición

FÍSICA CUÁNTICA

EDICIONES PIRÁMIDE

COLECCIÓN «CIENCIA Y TÉCNICA»

Edición en versión digital

Está prohibida la reproducción total o parcial de este libro electrónico, su transmisión, su descarga, su descompilación, su tratamiento informático, su almacenamiento o introducción en cualquier sistema de repositorio y recuperación, en cualquier forma o por cualquier medio, ya sea electrónico, mecánico, conocido o por inventar, sin el permiso expreso escrito de los titulares del copyright.

© Carlos Sánchez del Río (Coord.), 2015
© Primera edición electrónica publicada por Ediciones Pirámide (Grupo Anaya, S. A.), 2015
Para cualquier información pueden dirigirse a piramide_legal@anaya.es
Juan Ignacio Luca de Tena, 15. 28027 Madrid
Teléfono: 91 393 89 89
www.edicionespiramide.es
ISBN digital: 978-84-368-3305-8

Relación de autores

Carlos Sánchez del Río (coord.)
Profesor Emérito. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

Ramón Fernández Álvarez-Estrada
Profesor Emérito de Física Teórica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

José Luis Escudero Soto
Profesor titular de Óptica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

Luis García Gonzalo
Catedrático de Física Aplicada. Escuela Politécnica Superior. Universidad Carlos III de Madrid.

José Manuel Guerra Pérez
Catedrático de Óptica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

Pedro M. Mejías Arias
Catedrático de Óptica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

Antonio Muñoz Sudupe
Catedrático de Física Teórica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

Marina Ramón Medrano
Profesora Emérito de Física Teórica. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

José Luis Vicent López
Catedrático de Física de la Materia Condensada. Facultad de Ciencias Físicas. Universidad Complutense.

© Ediciones Pirámide

Índice

Prólogo 23

PARTE PRIMERA
Orígenes de la física cuántica

1. Radiación del cuerpo negro 29

1.1. Introducción 29
1.2. Radiación térmica: ley de Kirchhoff. Concepto de cuerpo negro 29
1.3. Modelos experimentales de cuerpo negro 33
1.4. Leyes de radiación del cuerpo negro 35
1.5. Fórmula de Rayleigh-Jeans 37
1.6. Fórmula de Planck 43
1.7. Teoría de Planck del cuerpo negro: deducción de la fórmula de Planck 45
1.8. Aplicación en termometría: pirómetro óptico 50
Ejercicios 51

2. Comportamiento corpuscular de la radiación 53

2.1. Introducción 53
2.2. Efecto fotoeléctrico 53
2.3. Emisión de rayos X 59
2.4. Efecto Compton 62
2.5. Descripción corpuscular de otros fenómenos ópticos 71
Ejercicios 74

3. Dualidad onda-corpúsculo. Relaciones de indeterminación 77

3.1. Introducción 77
3.2. Dualidad onda-corpúsculo de la radiación 77
3.3. Postulado de De Broglie. Dualidad onda-corpúsculo de la materia 82
3.4. Confirmación experimental del postulado de De Broglie 86
3.5. Principio de indeterminación 92
3.6. Complementariedad 98
Ejercicios 101

© Ediciones Pirámide

4. Modelos atómicos. Series espectrales 103

4.1. Introducción 103
4.2. Modelo atómico de Thomson 103
4.3. Modelo atómico de Rutherford 109
4.4. Sección eficaz 116
4.5. Series espectrales. Principio de combinación 121
4.6. Insuficiencia del modelo atómico de Rutherford 125
Ejercicios 127

5. Teoría de Bohr 129

5.1. Introducción 129
5.2. Postulados de Bohr 129
5.3. Confirmación experimental de la teoría de Bohr 137
5.4. Reglas de cuantificación de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara 143
5.5. Principio de correspondencia 152
5.6. Insuficiencia de la teoría cuántica antigua 155
Ejercicios 156

Soluciones a los ejercicios (capítulos 1 a 5) 159

PARTE SEGUNDA
Mecánica cuántica

6. Ecuación de Schrödinger e introducción a la interpretación probabilística 169

6.1. Fenómenos ondulatorios y ecuaciones de ondas en física clásica 169
6.2. Función de onda y ecuación de ondas de Schrödinger 171
6.3. Principio de superposición para ondas de materia 174
6.4. Partícula en potencial exterior: ecuación de Schrödinger 175
6.5. Evolución de un paquete de ondas libre 178
6.6. Interpretación probabilística de la función de onda 182
6.7. Imagen hidrodinámica: corriente de probabilidad y ecuación de continuidad 185
6.8. Normalización de la función de onda 188
6.9. Probabilidad de encontrar la partícula: explicación mediante copias idénticas del sistema 189
Ejercicios 191

7. Desarrollo de la interpretación probabilística 193

7.1. Partícula macroscópica en mecánica clásica: revisión de algunas propiedades generales 193
7.2. Valores medios de la posición 194
7.3. El momento en mecánica cuántica 195
7.4. Consistencia de la interpretación 197
7.5. La energía en mecánica cuántica 198
7.6. Interpretación probabilística en el espacio de momentos 200
7.7. Reglas de conmutación de posiciones y momentos 201

© Ediciones Pirámide

7.8. Incertidumbres y relaciones de incertidumbre para posiciones y momentos 202
7.9. Incertidumbre en la energía y relación de incertidumbre energía-tiempo 205
7.10. Estados estacionarios y propiedades 206
7.11. Partícula microscópica cargada en campo electromagnético exterior 210
7.12. Sistema con dos o más partículas microscópicas diferentes 211
7.13. Operadores autoadjuntos conmutantes 216
Cuestiones complementarias 218
Ejercicios 224

8. Estados ligados en una dimensión 227

8.1. Introducción 227
8.2. Pozo de paredes infinitas 228
8.3. Pozo cuadrado 232
8.4. El oscilador armónico unidimensional 237
Ejercicios 243

9. Coeficientes de reflexión y transmisión 245

9.1. Introducción 245
9.2. Escalón de potencial 245
9.3. Barrera de potencial 248
9.4. Colisión de paquetes de ondas 252
9.5. Evolución libre de un paquete gaussiano 254
Ejercicios 256

10. Sistemas tridimensionales 259

10.1. Introducción 259
10.2. Pozo infinito en tres dimensiones 260
10.3. El oscilador armónico tridimensional 263
10.4. Partícula cargada en un campo magnético uniforme 265
Ejercicios 270

11. Momento angular 273

11.1. El problema de dos cuerpos 273
11.2. Potenciales centrales 274
11.3. Momento angular orbital 276
11.4. Autovalores y autofunciones: armónicos esféricos 278
11.5. Reglas de conmutación 285
11.6. Momento angular en general. Propiedades y espectro 287
11.7. Autoestados 289
Cuestiones complementarias 292
Ejercicios 293

12. Potenciales centrales 295

12.1. Introducción 295
12.2. Pozo esférico. Solución de la ecuación radial 297

© Ediciones Pirámide

12.3. Potencial coulombiano: átomo de hidrógeno 303
12.4. Oscilador armónico isótropo 314
Ejercicios 317

13. Espín 321

13.1. Interacción de un átomo con un campo magnético 321
13.2. Descripción del experimento 324
13.3. Discusión de los resultados del experimento 324
13.4. Función de onda e interpretación probabilística 325
13.5. Composición de espines 328
Ejercicios 331

14. Métodos de aproximación 333

14.1. Introducción 333
14.2. Teoría de perturbaciones estacionarias. Niveles no degenerados 334
14.3. Teoría de perturbaciones. Niveles degenerados 338
14.4. Método variacional 339
14.5. Perturbaciones dependientes del tiempo 342
Ejercicios 346

15. Partículas idénticas. Fotones 349

15.1. Partículas idénticas en mecánica clásica y cuántica 349
15.2. Dos partículas microscópicas idénticas: función de onda 351
15.3. Ejemplo: dos partículas microscópicas libres 352
15.4. $N(>2)$ partículas microscópicas idénticas (I): función de onda 354
15.5. $N(>2)$ partículas microscópicas idénticas (II): algunas propiedades generales 355
15.6. $N>2$ fermiones en potencial exterior 357
15.7. Introducción a la mecánica cuántica de un fotón 358
15.8. Sistemas con $N \geqslant 2$ fotones 363
Ejercicios 364

16. Introducción a la Mecánica Estadistica Cuántica 367

16.1. Aspectos generales 367
16.2. Estadística clásica de Boltzmann con degeneración: revisión detallada 370
16.3. Estadística cuántica de Fermi-Dirac 373
16.4. Estadística cuántica de Bose-Einstein 376
16.5. Algunas propiedades generales 379
16.6. Estadísticas cuánticas: reinterpretación e inclusión de interacciones entre constituyentes 380
Cuestiones complementarias 384
Ejercicios 388

17. Aplicaciones de las estadísticas cuánticas 391

17.1. Gas ideal clásico monoatómico 391
17.2. Gas de fotones de equilibrio termodinámico dentro de una cavidad 392

© Ediciones Pirámide

17.3. Gas de fonones: calor específico de un sólido cristalino ... 395
17.4. Gas ideal de Fermi ... 398
17.5. Gas ideal de Bose. Condensación de Bose-Einstein ... 407
Cuestiones complementarias ... 414
Ejercicios ... 416

18. Introducción a la teoría cuántica de la dispersión ... 419

18.1. Aplicación de la interpretación probabilística: dispersión de una partícula por un potencial ... 419
18.2. Justificación de [18.1.3] y una representación para $f(\boldsymbol{p}', \boldsymbol{p})$ ... 423
18.3. Aproximación de Born para $f(\boldsymbol{p}', \boldsymbol{p})$: aplicación a los potenciales de Yukawa y Coulomb ... 426
18.4. Dispersión por un potencial cristalino: una discusión elemental ... 428
18.5. Distribución de la corriente de probabilidad: el teorema óptico ... 430
18.6. Dispersión por potenciales centrales: (I) Defasajes ... 438
18.7. Dispersión por potenciales centrales: (II) Resonancias ... 442
Cuestiones complementarias ... 446
Ejercicios ... 449

Soluciones a los ejercicios (capítulos 6 a 18) ... 453

PARTE TERCERA
Átomos

19. El átomo de hidrógeno ... 507

19.1. Introducción ... 507
19.2. Función de ondas del átomo de hidrógeno ... 508
19.3. Corrección relativista al átomo de hidrógeno ... 509
19.4. La corrección relativista y el término de Darwin ... 514
19.5. El acoplo espín-órbita y la estructura fina en los átomos hidrogenoides ... 518
19.6. Otras correcciones ... 522
Ejercicios ... 522

20. Átomos en campos externos constantes ... 525

20.1. Introducción ... 525
20.2. El efecto Zeeman ... 525
20.3. El efecto Stark ... 532
Ejercicios ... 536

21. Absorción y emisión de luz por los átomos ... 537

21.1. Introducción ... 537
21.2. Resumen de la teoría clásica de la interacción radiación-materia ... 538
21.3. Teoría semiclásica de la interacción radiación-materia ... 544
21.4. Osciladores clásicos y cuánticos ... 552
21.5. Las reglas de selección ... 553
Ejercicios ... 556

© Ediciones Pirámide

22. El átomo de helio 559

22.1. Introducción 559
22.2. El espectro del átomo de helio 561
22.3. Partículas idénticas. El átomo de helio 563
22.4. Complemento 1: resolución aproximada de la ecuación del átomo de helio 572
Ejercicios 574

23. Átomos multielectrónicos 577

23.1. Introducción 577
23.2. Aproximación de un electrón 577
23.3. Método de Hartree 580
23.4. Clasificación de los orbitales atómicos 582
23.5. Configuración electrónica. Tabla periódica 584
23.6. Acoplos residuales 586
23.7. Acoplo Russell-Saunders 589
23.8. Acoplo JJ 595
23.9. Estructura hiperfina 597
23.10. Complemento 1: espectros de rayos X. Ley de Moseley 599
Ejercicios 602

Soluciones a los ejercicios (capítulos 19 a 23) 603

PARTE CUARTA
Moléculas

24. Niveles electrónicos de las moléculas diatómicas 611

24.1. Introducción 611
24.2. Estructura molecular 611
24.3. Descripción cuántica de las moléculas 616
24.4. Moléculas diatómicas. Aproximación de Born-Oppenheimer 616
24.5. Términos electrónicos de la molécula H_2^+ 621
Ejercicios 627

25. Términos moleculares 629

25.1. Introducción 629
25.2. Clasificación de los términos moleculares en aproximación de un electrón 630
25.3. Términos moleculares y atómicos. Acoplamiento de momentos 632
25.4. Términos degenerados 634
25.5. Ejemplos 638
Ejercicios 640

26. Interpretación física del enlace químico 641

26.1. Introducción 641
26.2. Teorías precuánticas del enlace químico 642

© Ediciones Pirámide

26.3. El estado fundamental y la valencia 644
26.4. Geometría de los enlaces en moléculas poliatómicas 649
26.5. Momentos dipolares. Fuerzas intermoleculares 652
Ejercicios 654

27. El movimiento de los núcleos 655

27.1. Introducción 655
27.2. Las rotaciones y vibraciones moleculares 656
27.3. Calor específico de los gases moleculares 659
27.4. La ecuación nuclear en las moléculas diatómicas 661
27.5. Limitaciones al concepto de molécula 667
Ejercicios 671

28. Espectroscopía molecular 673

28.1. Introducción 673
28.2. Espectros moleculares 674
28.3. Fenómenos de dispersión. Efecto Raman 680
28.4. Instrumentación espectroscópica 682
Ejercicios 685

Soluciones a los ejercicios (capítulos 24 a 28) 687

PARTE QUINTA
Sólidos

29. La estructura cristalina del estado sólido 697

29.1. Planteamiento general 697
29.2. La red cristalina 699
29.3. El efecto de la temperatura: fonones 701
29.4. Difracción en una red cristalina 708
Ejercicios 718

30. Electrones en sólidos 721

30.1. Electrones en la red cristalina: teorema de Bloch y teoría de bandas 721
30.2. Algunos conceptos básicos: superficies de Fermi, masas efectivas y huecos 729
30.3. Semiconductores 734
Ejercicios 739

31. Algunos efectos cuánticos en sólidos 741

31.1. Introducción 741
31.2. Conducción en metales 742
31.3. Electrones «calientes» en semiconductores 748
31.4. Resonancias magnéticas 752
31.5. Niveles de Landau 755
Ejercicios 760

© Ediciones Pirámide

32. Orden magnético espontáneo en sólidos 761

32.1. Fenomenología del orden magnético 761
32.2. Teorías de canje 765
32.3. Magnetismo de los elementos de transición y de las tierras raras 772
Ejercicios 778

33. Superconductividad 779

33.1. Fenomenología de la superconductividad 779
33.2. La teoría BCS 780
33.3. Efectos cuánticos macroscópicos en superconductor: cuantización del flujo magnético y efecto Josephson 789
Ejercicios 794

Soluciones a los ejercicios (capítulos 29 a 33) 801

PARTE SEXTA
Núcleos atómicos

34. Núcleos atómicos y procesos nucleares 817

34.1. El núcleo atómico: generalidades 817
34.2. Probabilidad de las reacciones nucleares 820
34.3. Probabilidad de las desintegraciones nucleares 823
34.4. Cinemática de los procesos nucleares 826
34.5. Desintegraciones y reacciones nucleares 828
34.6. Reacciones en el sistema del centro de masas 830
Ejercicios 833

35. Interacción de radiaciones ionizantes con la materia 835

35.1. Radiaciones ionizantes 835
35.2. Interacción de partículas cargadas con la materia 835
35.3. Penetración de partículas cargadas en la materia 839
35.4. Interacción de fotones con la materia 841
35.5. Penetración de fotones en la materia 846
35.6. Detección de radiaciones ionizantes 848
Ejercicios 849

36. Estructura de los núcleos atómicos 851

36.1. El núcleo como sistema cuántico 851
36.2. Masa, tamaño y forma de los núcleos 852
36.3. Magnetismo nuclear 854
36.4. Fuerzas nucleares 857
36.5. Modelo nuclear de la gota líquida 861
36.6. Modelo nuclear de capas 864
36.7. Modelo nuclear colectivo 866
Ejercicios 866

© Ediciones Pirámide

37. Radioactividad 869

37.1. Radioactividad natural y artificial 869
37.2. Fenomenología de la emisión gamma 870
37.3. Absorción resonante 872
37.4. Reglas de selección en la emisión gamma 874
37.5. Fenomenología de la desintegración alfa 876
37.6. Emisión alfa y efecto túnel 878
37.7. Fenomenología de la emisión beta 879
37.8. Teoría elemental de la emisión beta 882
Ejercicios 884

38. Reacciones nucleares 885

38.1. Reacciones nucleares: generalidades 885
38.2. Reacciones producidas por neutrones 886
38.3. Reacciones producidas por partículas cargadas 887
38.4. Reacciones producidas por fotones 888
38.5. Principios de conservación en las reacciones nucleares 888
38.6. Principio del balance detallado 890
38.7. Sistemática de las reacciones nucleares 891
38.8. Reacciones que ocurren mediante el núcleo compuesto 893
38.9. Secciones eficaces para partículas lentas 894
38.10. Fórmula de Breit-Wigner 895
Ejercicios 896

Soluciones a los ejercicios (capítulos 34 a 38) 899

PARTE SÉPTIMA
Partículas elementales

39. Aspectos generales de las partículas elementales 909

39.1. Partícula elemental 909
39.2. Masa y carga. Unidades naturales 909
39.3. Primeros ejemplos: protón, neutrón, electrón y fotón. 911
39.4. Rayos cósmicos: nuevas partículas. Antipartículas 913
39.5. Clasificación de partículas 915

40. Interacciones entre partículas elementales 919

40.1. Interacciones fundamentales 919
40.2. Interacción electromagnética 920
40.3. Interacciones fuertes (resonancias; partículas extrañas) 921
40.4. Interacciones débiles: partículas $W^{\pm}$, Z° 923
40.5. Hadrones (bariones y mesones) y leptones 925
40.6. Interacción gravitatoria 926

© Ediciones Pirámide

41. Leyes de conservación 927

41.1. Simetrías y leyes de conservación: absolutas y relativas 927
41.2. Leyes de conservación espacio-temporales 928
41.3. Conservación de la carga eléctrica 929
41.4. Isospín 929
41.5. Números cuánticos internos aditivos 931
41.6. Relación de Gell-Mann y Nishijima 935
41.7. Inversión espacial (P: Paridad) 936
41.8. Conjugación de carga (C) 938
41.9. Simetría CP 938
41.10. Inversión temporal (T) 940
41.11. Simetría CTP 941
41.12. Resumen 941

42. Estructura de las partículas: las familias 943

42.1. Las tres familias leptónicas: el leptón pesado (τ) 943
42.2. Estructura de los hadrones: los quarks 944
42.3. El tercer quark: s («strange»: extraño) 948
42.4. El cuarto quark: c («charm»: encanto) 949
42.5. El quinto quark: B («beauty»: belleza) 950
42.6. El sexto quark: t («truth»: verdad) 951
42.7. El color 952
42.8. El confinamiento: los gluones 953
42.9. Modelo estándar 955
42.10. Supersimetría: nexo entre bosones y fermiones 956
Ejercicios 957

Soluciones a los ejercicios (capítulos 39 a 42) 961

Tablas de partículas 971

APÉNDICE

A. Unidades y cálculos en física cuántica 977

A.1. Unidades especiales 977
A.2. Constantes fundamentales 978
A.3. Unidades de Gauss 979
A.4. Cálculos 980
A.5. Otros sistemas de unidades 981

B. Formalismo matemático en mecánica cuántica 985

C. Funciones especiales y tablas 991

C.1. Función gamma 991
C.2. Función zeta de Riemann 992

© Ediciones Pirámide

C.3. Polinomios de Hermite 992
C.4. Funciones esféricas de Bessel 994
C.5. Polinomios generalizados de Laguerre 995
C.6. Polinomios de Legendre 997
C.7. Funciones asociadas de Legendre 998
C.8. Armónicos esféricos 999
C.9. Desarrollos en armónicos esféricos 999
C.10. Coeficientes de Clebsch Gordan 1000

D. Cinemática relativista 1003

D.1. Introducción 1003
D.2. Relaciones entre variables en el sistema de laboratorio y en el centro de masas 1006

E. Interferencia de un fotón consigo mismo 1011

E.1. Experimentos anteriores a 1970 1011
E.2. Otros experimentos 1013
Bibliografía 1015

F. Interferencia y difracción de neutrones 1017

F.1. Aspectos generales 1017
F.2. Cambio de signo de la función de onda neutrónica debido a una rotación de 360° o a un campo magnético 1021
F.3. Efectos de la gravedad sobre los neutrones térmicos 1022
F.4. Otros efectos con neutrones térmicos 1024
F.5. Neutrones fríos 1025
F.6. Neutrones ultrafríos 1026
F.7. Copias idénticas de un sistema y sistema individual 1026
Nota adicional 1029
Bibliografía 1030

G. Teorías de variables ocultas. Resultados experimentales 1033

G.1. Mecánica cuántica y teorías de variables ocultas: algunas generalidades 1033
G.2. Emisión de fotones en cascada 1036
G.3. Aniquilación electrón-positrón en dos fotones 1038
G.4. Dispersión elástica protón-protón a baja energía 1040
G.5. Mediciones sucesivas en un sistema mecano-cuántico 1042
G.6. Relación de incertidumbre posición-momento: experimentos 1042
G.7. Conclusión 1044
Bibliografía 1045

H. Bandas en una dimensión: modelo de Krönig-Penney 1049

I. Superconductores de alta temperatura crítica 1053

J. Efecto Hall cuántico 1055

K. El láser 1061

© Ediciones Pirámide

L. La energía nuclear de fisión 1067

M. La energía nuclear de fusión 1071

N. Fuentes. Aceleradores. Detectores 1077

N.1. Fuentes 1077
N.2. Aceleradores 1078
N.2.1. Introducción 1078
N.2.2. LEP 1080
N.3. LHC (Large Hadron Collider) 1082
N.4. Detectores 1083

O. Unidades radiológicas y efectos biológicos de las radiaciones ionizantes .. 1085

O.1. Unidades 1085
O.2. Efectos biológicos 1086
O.3. Dosis admisibles 1087

P. Solución numérica de la ecuación de Schrödinger 1089

P.1. Introducción 1089
P.2. Integración de la ecuación de Schrödinger: función de onda 1090
P.3. Cálculo de la energía 1093
P.4. Otros métodos 1100
P.5. Dispersión cuántica en una dimensión 1103

Q. La oscilación de los neutrinos 1105

Q.1. Fuentes de neutrinos 1105
Q.2. Neutrinos solares y atmosféricos 1106
Q.3. Oscilación de neutrinos 1107
Q.4. Neutrinos cósmicos 1110
Q.5. Neutrinos estériles y materia oscura 1111
Bibliografía 1112

R. Información cuántica: una introducción elemental 1113

R.1. Qubits 1113
R.2. Estados entrelazados o enredados *(entangled states)* 1115
R.2.1. Estados EPR (Einstein, Podolsky y Rosen) o de Bell 1115
R.2.2. Fotones entrelazados: estados de polarización y modos espaciales 1116
R.2.3. Fotones en un divisor de haces *(beam splitter)* 1118
R.2.4. Generación experimental de estados entrelazados de dos fotones 1120
R.3. Puertas lógicas cuánticas 1123
R.3.1. Puertas lógicas clásicas 1123
R.3.2. Puertas lógicas cuánticas 1124
R.3.3. El teorema de no-clonación 1125
R.3.4. Puertas lógicas cuánticas experimentales 1126
R.4. Teleportación cuántica 1128
R.4.1. La propuesta teórica de la teleportación 1128

© Ediciones Pirámide

R.4.2. Realización experimental de la teleportación cuántica 1131
R.5. Algoritmos cuánticos 1136
R.5.1. Un ejemplo sencillo 1136
R.5.2. Algoritmo cuántico (Shor) 1137
R.6. Otros desarrollos 1139
Agradecimientos 1139
Bibliografía 1140

S. Nanoestructuras y física cuántica 1141

Bibliografía 1144

T. Atrapamiento y manipulación de iones, átomos y fotones individuales 1145

T.1. Trampas de iones y partículas neutras 1145
T.2. Enfriamiento láser 1147
T.3. Cavidades, átomos de Rydberg e interacción fotón-átomo aproximada 1151
T.3.1. Átomos y radiación en cavidades 1151
T.3.2. Átomos en estados de Rydberg 1151
T.3.3. Un modelo aproximado para la interacción fotón-átomo 1153
T.4. Interpretación estadística. Medición. Decoherencia 1154
T.4.1. Revisitando el experimento de la doble rendija 1154
T.4.2. Medición e interpretación de Copenhague 1155
T.4.3. Medición y decoherencia: la influencia del medio ambiente (*MA*) 1157
T.4.4. Decoherencia: otros aspectos 1160
T.4.5. Modelos para una *MA* cuántico y su interacción con un sistema cuántico *S* 1161
T.5. El gato de Schrödinger 1163
T.5.1. La paradoja 1163
T.5.2. Decoherencia debida al *MA* como solución a la paradoja del gato de Schrödinger 1164
T.6. Experimentos reales con sistemas individuales 1164
T.6.1. Manipulación de iones individuales atrapados 1165
T.6.2. Manipulación de fotones individuales en cavidades 1167
T.7. Tests experimentales de la decoherencia cuántica 1169
T.7.1. Tests manipulando iones atrapados mediante radiación 1170
T.7.2. Tests manipulando fotones en cavidades mediantes haces atómicos 1170
Bibliografía 1171

Índice analítico 1173

© Ediciones Pirámide

Prólogo

La Física Cuántica es la física de nuestro siglo. Su conocimiento es imprescindible para cualquier físico y muy necesario para otros profesionales (químicos, ingenieros, etc.). Por otra parte, los conceptos cuánticos son tan ajenos a nuestra intuición que su estudio debe interesar también a los pensadores que no se conformen con una visión incompleta de nuestra cultura

A pesar de un interés tan general, el presente libro es consecuencia de una necesidad muy concreta: proporcionar un texto para la materia troncal de Física Cuántica en la carrera de Ciencias Físicas. Los libros que existen con un título análogo al que presentamos son, en general, demasiado elementales. Cuando nuestros estudiantes cursan la Física Cuántica tienen una preparación matemática y un conocimiento de física clásica suficientes para que se les pueda ofrecer un curso de física cuántica de nivel intermedio. Ése es el nivel con el que se ha concebido este libro.

El texto consta de siete partes. Los primeros capítulos son una introducción a los fenómenos cuánticos y a las primeras teorías que se formularon para describirlos. La segunda parte es la más larga y constituye una mecánica cuántica elemental bastante completa. Las otras cinco partes muestran la fertilidad de los conceptos cuánticos en el estudio de los átomos, las moléculas, los sólidos, los núcleos atómicos y las partículas subnucleares. Además, una serie de apéndices complementan o amplían el texto principal.

Como puede verse, el libro es bastante completo y conviene advertir que su contenido total no puede ser asimilado por un alumno normal en un curso. La razón de que se haya decidido presentar una temática tan amplia es doble. Por una parte, ello permite que cada profesor seleccione aquellos capítulos que le parezcan más adecuados al curso que desee impartir. En segundo lugar, hay estudiantes para quienes este curso de física cuántica es terminal por la especialización que eligen para completar sus estudios de grado; parece conveniente que, en el futuro, estos alumnos puedan consultar cuestiones no estudiadas sin recurrir a monografías de un nivel más alto. Finalmente, se ha pensado también que un texto razonablemente completo sería de mayor utilidad para estudiantes de otras carreras a los que nos hemos referido más arriba.

El libro ha sido escrito por nueve autores, todos profesores con amplia experiencia en la materia. Se ha procedido así por dos motivos. El primero es de carácter práctico; un libro de esta envergadura es tarea que requeriría dedicación completa durante mucho tiempo si hubiera de ser escrito por un solo autor. El segundo motivo es que la multiplicidad de autores permite que cada parte sea obra de un especialista, y ello garantiza el rigor.

© Ediciones Pirámide

Evidentemente, la redacción de un libro de texto por muchos autores tiene también sus inconvenientes. Es imposible asegurar la homogeneidad, por mucho esfuerzo de coordinación que los autores acepten. Ante esta imposibilidad hemos creído preferible aceptar el hecho con el convencimiento de que la inevitable variedad tiene también una ventaja. Cuando los alumnos dejan de serlo y pasan a una vida profesional se ven obligados a enfrentarse a escritos muy variados, y no es malo que se vayan acostumbrando al mundo real que encontrarán una vez terminados sus estudios.

Con objeto de no omitir nada que fuera importante, hemos preferido caer, en ocasiones, en el defecto contrario, y por eso no hemos evitado siempre las redundancias; un mismo concepto o una misma cuestión puede aparecer en varios capítulos si de ese modo se consigue que cada tema sea comprensible sin necesidad de recurrir continuamente a otras partes del libro.

En cuanto a las unidades, son varios los sistemas que se utilizan en Física Cuántica, y el estudiante debe acostumbrarse a usar todos. Se supone que el lector está familiarizado con el Sistema Internacional (SI), que es el sistema legal de unidades. Los demás sistemas se exponen en un apéndice.

Los autores agradecen a las señoritas V. Berral, J. Cereceda, R. Flores y M. A. Iglesias su colaboración en la preparación del original.

CARLOS SÁNCHEZ DEL RÍO

© Ediciones Pirámide

Notación

Las cifras decimales que aparecen en el texto se han escrito con un punto en vez de una coma, como es usual en las tablas de datos físicos.

© Ediciones Pirámide

PARTE PRIMERA

Orígenes de la física cuántica

- Radiación del cuerpo negro.
- Comportamiento corpuscular de la radiación.
- Dualidad onda-corpúsculo. Relaciones de indeterminación.
- Modelos atómicos. Series espectrales.
- Teoría de Bohr.

BIBLIOGRAFÍA

Chpolski, E. (1977). *Physique Atomique,* 2 vols. Moscú: MIR.

Este libro presenta un análisis claro y minucioso de los fenómenos cuánticos, proporcionando, asimismo, una visión amplia y pormenorizada de sus aspectos experimentales.

Cropper, W. H. (1970). *The Quantum Physicists.* Londres: Oxford University Press.

De lectura muy amena, en este libro son acertadamente analizados conceptos y fenómenos cuánticos enmarcados en su contexto histórico.

Eisberg, R. M. (1973). *Fundamentos de Física Moderna.* México: Limusa.

Libro de texto en el que, a lo largo de cinco de sus capítulos, se exponen de manera sencilla y con cierto detalle los orígenes de la fisica cuántica.

Eisberg, R. M. y Resnick, R. (1978). *Física Cuántica.* México: Limusa.

Versión algo más elemental y menos detallada del libro anterior. Contiene numerosos ejercicios ilustrativos y cuenta con buen número de cuestiones y problemas propuestos.

Galindo, A. y Pascual, P. (1985). *Mecánica Cuántica.* Madrid: UNED.

Esencialmente es un libro de ejercicios y problemas resueltos, bien seleccionados y con nivel y temática equiparables a los de este libro. Los comentarios y acotaciones al comienzo de cada capítulo proporcionan una acertada guía conceptual en el estudio de esta materia.

Galindo, A. y Pascual, P. (1989). *Problemas de Mecánica Cuántica.* Madrid: Eudema.

Es un libro de ejercicios y problemas resueltos, claramente explicados y clasificados según tres niveles, de los cuales el más elemental y también el más abundante se corresponde con el nivel de este libro.

Wichmann, E. H. (1971). *Quantum Physics,* vol. 4 (Berkeley Physics Course). Nueva York: McGraw-Hill.

Aunque estructurado de forma diferente a este libro, constituye una extensa introducción a las principales ideas cuánticas, analizadas con claridad y sencillez.

© Ediciones Pirámide

1 Radiación del cuerpo negro

Pedro M. Mejías

1.1. INTRODUCCIÓN

A finales del siglo pasado, tras el establecimiento de la teoría electromagnética de la luz y su posterior aplicación al estudio de la emisión de radiación por los átomos, la física clásica podía proporcionar explicaciones satisfactorias, confirmadas por los experimentos, de casi la totalidad de los fenómenos observados hasta entonces. Existían, no obstante, algunos desajustes importantes entre las previsiones teóricas clásicas y la experiencia, entre las que podíamos mencionar, por ejemplo, los relativos a los espectros de línea en el rango de las longitudes de onda visibles o la disminución con la temperatura del calor molar de los sólidos[1]. A estos fenómenos es preciso añadir el que históricamente puso en cuestión los conceptos tradicionales de la fisica clásica, introduciendo una profunda revisión del formalismo de la mecánica y de la electrodinámica. Nos estamos refiriendo a la emisión de radiación por determinados cuerpos en equilibrio térmico. De su estudio surgió en primer lugar la idea crucial de discretización (cuantificación) de la energía, la cual, posteriormente, se amplió a otras magnitudes y sistemas físicos, generándose así un cambio trascendental en nuestra concepción del mundo fisico. El análisis de la radiación térmica emitida por tales cuerpos y de las primeras y fundamentales consecuencias que de él se derivaron constituye el contenido del presente capítulo.

1.2. RADIACIÓN TÉRMICA: LEY DE KIRCHHOFF. CONCEPTO DE CUERPO NEGRO

Nuestra experiencia habitual nos muestra que los cuerpos sólidos calentados a temperaturas suficientemente elevadas se vuelven incandescentes, es decir, emiten radiación en el rango de frecuencias correspondiente al espectro visible. Por ejemplo, en un horno, conforme se va calentando una barra de hierro, su color pasa de ser rojo oscuro a amarillo claro, e incluso, a muy altas temperaturas, presenta un tono blanco azulado. Esto no

[1] Se denomina calor molar de una sustancia a la cantidad de calor que es necesario comunicar a un mol de dicha sustancia para elevar 1 K su temperatura. Para temperaturas altas el calor molar de los sólidos se comportaba experimentalmente según las leyes de la mecánica estadística clásica, pero ésta no era capaz de explicar su disminución con la temperatura.

© Ediciones Pirámide

significa que a temperaturas ordinarias (300 K) los cuerpos no radien, sino que en realidad lo hacen principalmente con frecuencias más allá del infrarrojo. De hecho, incluso a temperaturas elevadas (>1000 K), la mayor parte de la radiación emitida por un cuerpo resulta invisible para el hombre. Es importante señalar que los cuerpos no incandescentes (los que observamos comúnmente en nuestra vida diaria) pueden verse no por la luz que emiten, sino por la que reflejan: basta recordar que en una habitación totalmente a oscuras no es posible ver ningún objeto a menos que se le caliente. Así, si en un cuarto sin luz encendemos una estufa, al poco tiempo la resistencia alcanzará el tono rojizo característico, haciéndose visible ella misma e iluminando además el resto de la habitación, en este caso por reflexión de la radiación emitida en los diversos objetos y paredes. A esta energía electromagnética emitida por los cuerpos como consecuencia de su temperatura la denominaremos radiación térmica. Dicha radiación presenta una distribución espectral continua, cuya forma concreta depende de la temperatura establecida.

Consideremos ahora una cavidad vacía cuya superficie interior es perfectamente reflectante, en la cual colocamos un cuerpo aislado térmicamente de las paredes de dicha cavidad (podemos imaginar, por ejemplo, que se encuentra suspendido de un alambre muy delgado no conductor, como en la figura 1.1). Admitamos además que las paredes de la cavidad se mantienen a temperatura constante, emitiendo la correspondiente radiación térmica.

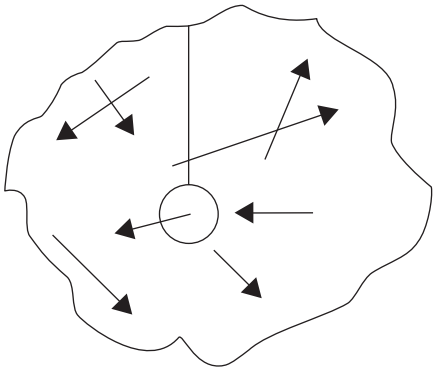


Figura 1.1. Esquema ilustrativo del intercambio energético entre un cuerpo y las paredes de una cavidad.

Si sobre el cuerpo incide radiación, parte de ésta será reflejada, mientras que el resto penetrará en su interior. De esta última una fracción volverá al exterior mediante transmisión simple o tras múltiples reflexiones internas, y otra parte será absorbida y transformada en calor. Este calentamiento hace que el cuerpo a su vez emita radiación, que se distribuirá por la cavidad y se reflejará sobre las paredes. Se establece, por tanto, un intercambio energético entre el cuerpo y la cavidad exclusivamente por radiación, ya que no pueden tener lugar procesos de conducción o convección al no existir sustrato material entre el cuerpo y las paredes del recinto. Finalmente se alcanzará el equilibrio térmico cuando el cuerpo emita la misma cantidad de energía que absorbe. En tal caso, la temperatura del cuerpo será igual a la temperatura de las paredes de la cavidad.

© Ediciones Pirámide

Definamos la irradiancia espectral I_ν como la potencia de la radiación térmica incidente sobre el cuerpo, por unidad de área y unidad de intervalo de frecuencias. Denotemos por a_ν la fracción de I_ν que el cuerpo absorbe, que llamaremos poder absorbente, y designemos por R_ν la emitancia espectral, esto es, la potencia de la radiación térmica que el cuerpo emite por unidad de área y unidad de intervalo de frecuencias[2]. En el equilibrio se cumplirá

$$R_\nu = a_\nu I_\nu \qquad [1.2.1]$$

En la expresión anterior a_ν no debe confundirse con el coeficiente óptico de absorción, que mide la atenuación por unidad de longitud de un haz plano de radiación.

Supongamos ahora que en lugar de un único cuerpo tenemos un cierto número de ellos, cada uno con diferente poder absorbente. Cuando se alcance el equilibrio, aplicando la ecuación [1.2.1] a cada uno de ellos y teniendo en cuenta que el valor de I_ν es el mismo para todos los cuerpos, ya que se trata de la radiación contenida en la cavidad, nos quedará

$$I_\nu = \frac{R_{1\nu}}{a_{1\nu}} = \frac{R_{2\nu}}{a_{2\nu}} = \ldots \qquad [1.2.2]$$

donde los subíndices 1, 2, ..., designan los diferentes cuerpos. La ecuación [1.2.2], conocida como ley de Kirchhoff, nos indica, por tanto, que para cada frecuencia el cociente entre la potencia emitida por unidad de área y el poder absorbente es, en el equilibrio, el mismo para todos los cuerpos, e igual a la irradiancia de la radiación térmica dentro de la cavidad. Naturalmente, I_ν varía con la temperatura, pero la relación [1.2.2] es válida siempre. La ley de Kirchhoff implica que un buen absorbente es también un buen emisor, y a la inversa. Recíprocamente, un buen reflector será un mal absorbente. Ésta es la razón por la que las paredes interiores de los termos se construyen espejadas.

A los absorbentes perfectos ($a_\nu = 1$) se les denomina *cuerpos negros*. Para ellos, R_ν alcanza su máximo valor posible

$$R_\nu = I_\nu \qquad [1.2.3]$$

Un cuerpo negro será, por tanto, un emisor perfecto, lo que implica a su vez que tales cuerpos no reflejan luz. Un ejemplo aproximado de cuerpo negro será cualquier objeto pintado con una capa mate de negro de humo. Sin embargo, desde un punto de vista práctico, un cuerpo negro puede construirse practicando un pequeño orificio en una cavidad cerrada (véase figura 1.2) mantenida a temperatura constante. La radiación que, procedente del exterior, incida sobre dicho orificio penetrará en la cavidad, siendo absorbida por las paredes de ésta tras sucesivas reflexiones internas. Si el tamaño del agujero es mucho más pequeño que el área total de dichas paredes, la probabilidad de que esta radiación vuelva a salir al exterior podrá considerarse despreciable. *El orificio* se comportará, por tanto, como absorbente perfecto. De esta forma, la radiación térmica emergente

[2] En otros textos de Física Cuántica y de Óptica no se sigue la nomenclatura empleada aquí para designar las magnitudes radiométricas. Así, por ejemplo, R_υ se denomina en algunos casos radiancia espectral y en otros poder emisivo. En el presente capítulo se ha utilizado la nomenclatura más habitual empleada en la literatura.

© Ediciones Pirámide

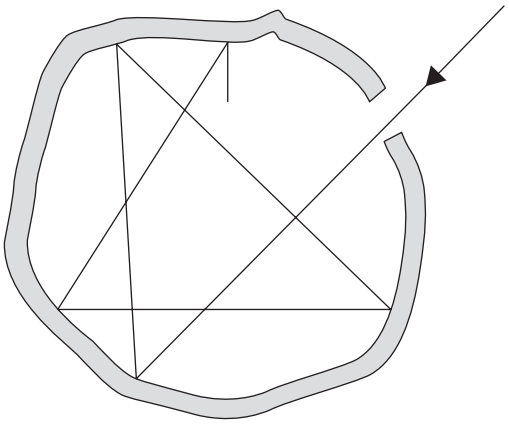


Figura 1.2. Esquema ideal de cuerpo negro. Cualquier radiación incidente sobre el pequeño orificio es absorbida finalmente por la cavidad.

hacia el exterior procedente de dicho agujero será espectralmene idéntica a la de un cuerpo negro. Más adelante veremos algunos modelos experimentales concretos de cuerpo negro. En lo que sigue, sin embargo, vamos a mostrar la relación simple que existe entre la emitancia $R_\nu(T)$ de la radiación térmica emitida por el orificio y la densidad espectral de energía electromagnética, $\rho_\nu(T)$, contenida en la cavidad, a temperatura absoluta T. Supongamos un agujero de área unidad. Obsérvese que la radiación emergente hacia el exterior lo hará con la velocidad c de la luz en cualquier dirección. Teniendo esto en cuenta, si calculamos la energía radiante que atraviesa en la unidad de tiempo el orificio en todas las direcciones posibles dentro de un ángulo sólido de 2π, es decir, hacia un hemisferio, obtenemos para cada frecuencia (véase ejercicio 1.1)

$$R_\nu(T) = \frac{c}{4}\rho_\nu(T) \qquad [1.2.4]$$

ya que dicha energía no es sino la potencia emitida por nuestro agujero de área unidad, es decir, la emitancia espectral de nuestro cuerpo negro. La relación [1.2.4] se cumple, además, para *cualquier* cuerpo negro en equilibrio térmico. De hecho, la densidad espectral de energía ρ_ν de la radiación térmica en el interior de una cavidad que contiene diversos cuerpos es totalmente independiente de las propiedades y de la forma de dichos cuerpos (entre los que deben incluirse las propias paredes del recinto). Por ello, el espectro de radiación emitida por un cuerpo negro en equilibrio térmico posee características universales. La razón de esta, en principio, sorprendente independencia se apoya en el segundo principio de la termodinámica. En efecto, supongamos que, por el contrario, ρ_ν en el equilibrio depende de la naturaleza de los cuerpos que se encuentran en el interior de la cavidad. Entonces, si disponemos de dos sistemas en equilibrio a la misma temperatura y los hacemos comunicar entre sí, romperíamos dicho equilibrio. Se introduciría así entre los dos sistemas una diferencia de temperaturas que podría ser empleada en la construcción

© Ediciones Pirámide

de un móvil perpetuo de segunda especie, lo cual, como sabemos, es imposible[3]. *Las magnitudes* R_ν y ρ_ν *son,* por tanto, *funciones universales, dependientes únicamente de la frecuencia y de la temperatura absoluta.*

Finalmente, si integramos la ecuación [1.2.4] para todas las frecuencias, tendremos

$$R(T) = \int_0^\infty R_\nu(T)\mathrm{d}\nu = \frac{c}{4}\int_0^\infty \rho_\nu(T)\mathrm{d}\nu = \frac{c}{4}\rho(T) \qquad [1.2.5]$$

que expresa la relación de proporcionalidad extremadamente simple que existe entre la emitancia total $R(T)$ emitida por una cavidad que se comporta como cuerpo negro y la densidad de energía electromagnética $\rho(T)$ en su interior.

1.3. MODELOS EXPERIMENTALES DE CUERPO NEGRO

Aunque a finales del siglo pasado, en 1899, aún no se conocía la expresión analítica exacta de $R_\nu(T)$, sin embargo, las medidas precisas de O. Lummer y E. Pringsheim mostraron la forma de esta función. En la figura 1.3 se ha representado la emitancia espectral de un cuerpo negro en función de la frecuencia para diferentes valores de la temperatura.

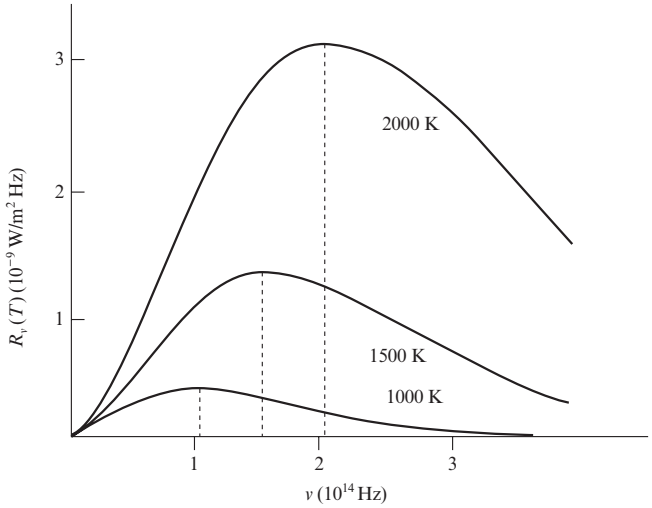


Figura 1.3. Emitancia espectral del cuerpo negro. Obsérvese que los máximos de radiación se desplazan hacia las altas frecuencias conforme aumentamos la temperatura. Al mismo tiempo, la radiancia total (área bajo las curvas) aumenta muy rápidamente con *T*.

[3] En 1850, Clausius enunció el segundo principio de la termodinámica en la siguiente forma: es imposible construir una máquina que transporte calor de una temperatura baja a otra alta sin consumir trabajo exterior. Una máquina de funcionamiento periódico que hiciera esto suele denominarse móvil perpetuo de segunda especie: su existencia violaría el segundo principio.

© Ediciones Pirámide

El modelo de cuerpo negro utilizado por Lummer y Pringsheim está esquematizado en la figura 1.4. Esencialmente, está formado por un recipiente metálico de dobles paredes. El espacio entre las paredes sirve para mantener una temperatura uniforme prefijada mediante el tránsito de vapor de agua o, para bajas temperaturas, llenándolo, por ejemplo, con aire líquido.

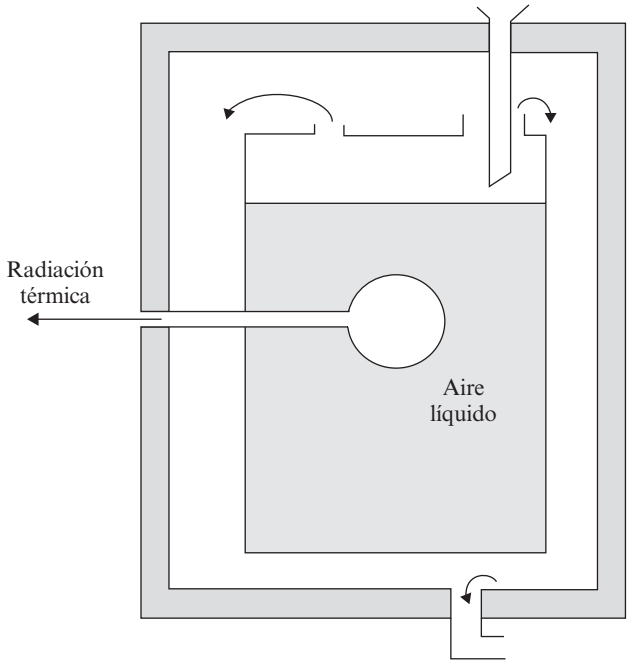


Figura 1.4. Esquema simplificado del modelo experimental de cuerpo negro empleado por Lummer y Pringsheim. Las flechas indican la circulación del aire gaseoso.

Precisamente la consecución de una temperatura estable y uniforme es una de las principales dificultades de tipo práctico con que nos enfrentamos al tratar de diseñar un modelo experimental de cuerpo negro. Ello exige emplear diferentes modelos dependiendo del rango de temperaturas considerado. Como ejemplo, la figura 1.5 muestra un posible esquema de cuerpo negro utilizado en el estudio de la radiación térmica emitida a temperaturas altas. El cilindro interior de porcelana se calienta de forma estable haciendo pasar una corriente eléctrica a través del cilindro exterior de platino. La temperatura se mide mediante un termopar P y los diafragmas d_1, d_2, d_3, ..., sirven para evitar el enfriamiento debido al aire que penetra desde el exterior.

© Ediciones Pirámide

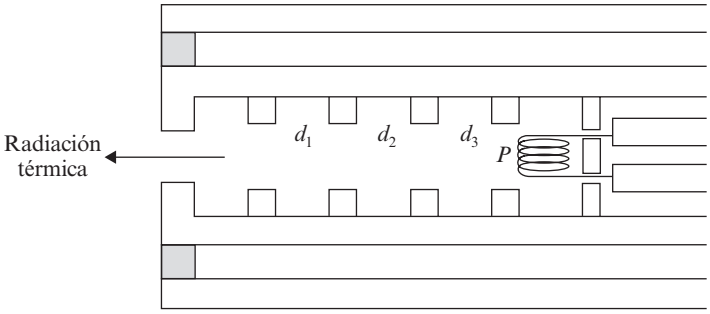


Figura 1.5. Esquema simplificado de un modelo experimental de cuerpo negro empleado para temperaturas elevadas.

1.4. LEYES DE RADIACIÓN DEL CUERPO NEGRO

De la ley de Kirchhoff y de la relación [1.2.4] se desprendía que la densidad espectral de energía, ρ_v, era una cierta función universal de la frecuencia y de la temperatura. Sin embargo, hasta ahora nada hemos dicho acerca de la forma concreta de dicha función. Por este motivo, encontrar la expresión correcta de ρ_v a finales del siglo pasado se convirtió en uno de los más importantes problemas no resueltos. En 1893, W. Wien había probado, empleando argumentos termodinámicos rigurosos, que ρ_v debería poder escribirse en la forma

$$\rho_v(T) \equiv \rho(v,\ T) = v^3 f(v/T) \qquad [1.4.1]$$

donde, desgraciadamente, la función $f(v/T)$ no se deducía explícitamente. No obstante, a pesar de este serio inconveniente, la fórmula de Wien permite establecer algunas consecuencias fundamentales.

Si se dispone (por ejemplo, experimentalmente) de la densidad de energía para una cierta temperatura T_1, mediante la fórmula de Wien podemos determinar la función $\rho(v, T)$ para cualquier otra temperatura. Se obtiene (véase ejercicio 1.2)

$$\rho(v_2, T_2) = \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^3 \rho(v_1, T_1) \qquad [1.4.2]$$

con $v_2 = T_2 v_1/T_1$. En otras palabras, basta multiplicar por el factor $(T_2/T_1)^3$ para hallar la densidad espectral correspondiente a la nueva temperatura T_2.

Por otro lado, integrando en frecuencias la relación [1.4.1] se tiene

$$\rho(T) = \int_0^\infty \rho(v,T)\mathrm{d}v = \int_0^\infty v^3 f(v/T)\mathrm{d}v \qquad [1.4.3]$$

© Ediciones Pirámide

que se convierte, haciendo uso del cambio de variables $\alpha = \nu/T$, en

$$\rho(T) = T^4 \int_0^\infty \alpha^3 f(\alpha) \mathrm{d}\alpha \qquad [1.4.4]$$

La integral que aparece en [1.4.4] es un número que designaremos por *a,* con lo que obtendremos finalmente

$$R(T) = \frac{c}{4}\rho(T) = \sigma T^4 \quad , \quad \sigma = ac/4 \qquad [1.4.5]$$

que es la bien conocida *ley de Stefan-Boltzmann,* enunciada por primera vez en 1879. La constante σ es la denominada constante de Stefan-Boltzmann, y su valor resulta ser

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-8}\ \mathrm{W/m^2K^4} \qquad [1.4.6]$$

La ecuación [1.4.5] nos indica que la cantidad total de energía radiada por un cuerpo negro en equilibrio térmico aumenta con la cuarta potencia de su temperatura absoluta.

En determinadas ocasiones resulta cómodo expresar la densidad espectral en función de la longitud de onda λ de la radiación, en lugar de hacerlo como hasta ahora en función de la frecuencia ν. Pero para ello es necesario tener presente que la densidad de energía en el intervalo de frecuencias ν, $\nu + \mathrm{d}\nu$ vale $\rho(\nu, T)\mathrm{d}\nu$ [y no simplemente $\rho(\nu, T)$], por lo que esa misma energía en el intervalo de longitudes de onda equivalente se escribirá $\tilde{\rho}(\lambda, T)\mathrm{d}\lambda$, es decir,

$$\rho(\nu, T)\mathrm{d}\nu = \tilde{\rho}(\lambda, T)\mathrm{d}\lambda \qquad [1.4.7]$$

Como $\nu = c/\lambda$, se tendrá

$$|\mathrm{d}\nu| = \frac{c}{\lambda^2}\mathrm{d}\lambda \qquad [1.4.8]$$

y aplicando la fórmula de Wien se llega a la expresión

$$\tilde{\rho}(\lambda, T)\mathrm{d}\lambda = \rho(\nu, T)\mathrm{d}\nu = \nu^3 f(\nu/T)\mathrm{d}\nu = \frac{c^4}{\lambda^5} f(c\ /\ \lambda T)\mathrm{d}\lambda \qquad [1.4.9]$$

El maximo de dicha distribución se alcanzará en el punto $\lambda_{\mathrm{máx}}$ para el cual se cumple $\mathrm{d}\tilde{\rho}(\lambda, T)/\mathrm{d}\lambda = 0$. Imponiendo esta condición a la ecuación [1.4.9] y haciendo el cambio de variables $c/\lambda\mathrm{T} \equiv \beta$, se obtiene para $\lambda_{\mathrm{máx}}$

$$\beta f'(\beta) + 5f(\beta) = 0 \qquad [1.4.10]$$

donde la prima indica derivación respecto de la nueva variable. La hipotética resolución de esta ecuación permitiría determinar un cierto valor numérico de β que la satisface. Designándole por β_0 y deshaciendo el cambio de variables, nos queda

© Ediciones Pirámide

$$\frac{c}{\lambda_{máx} T} = \beta_0 \qquad [1.4.11]$$

lo que implica

$$\lambda_{máx} T = \text{constante} \qquad [1.4.12]$$

que expresa la conocida *ley de desplazamiento de Wien.* En la figura 1.3 se comprueba que el máximo de las curvas se desplaza hacia las longitudes de onda más cortas (mayores frecuencias) conforme T aumenta. El valor determinado experimentalmente para la constante que aparece en [1.4.12], que llamaremos constante de Wien, es 2.898×10^{-3} m K. A la búsqueda de la función explícita $f(\nu/T)$ que nos proporcionará la expresión analítica exacta de $\rho(\nu/T)$ le fueron dedicados muchos esfuerzos en las postrimerías del pasado siglo. Y aunque, hasta llegar a Planck, el acuerdo con los datos experimentales fue sólo parcial o incluso mostraba fuertes discrepancias, esta búsqueda desempeñó un papel crucial en el posterior establecimiento de la teoría cuántica. Vamos, por ello, a analizar estos pasos con cierto detalle.

1.5. FÓRMULA DE RAYLEIGH-JEANS

La teoría cinética clásica considera la temperatura de un gas como una medida de la energía promedio de las moléculas que lo integran. Esto se desprende del llamado teorema de equipartición de la energía, el cual asigna a cada grado de libertad de una molécula una energía cinética promedio igual a $1/2k_BT$, donde k_B es la llamada constante de Boltzmann[4] ($k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ julios/K). Este resultado se justifica en mecánica estadística y es válido para sistemas en equilibrio termodinámico. Aunque acabamos de enunciarlo para moléculas de gas, este teorema clásico es también aplicable a un sistema de entes idénticos en equilibrio.

Fue precisamente Rayleigh el primero en usar el teorema de equipartición en el cálculo de la densidad de energía electromagnética en el interior de una cavidad cerrada. Téngase en cuenta al respecto que, como consecuencia de su temperatura, las paredes de la cavidad emitirán radiación térmica, la cual se reflejará sobre las mismas. Según veremos en breve, el campo electromagnético dentro de la cavidad puede descomponerse formalmente en ondas estacionarias de diferentes frecuencia, dirección y polarización. Son precisamente tales ondas los entes a que hacíamos alusión más arriba. Cuando se alcanza el equilibrio térmico entre la radiación y las paredes de la cavidad, la aplicación del teorema de equipartición nos da para la energía media asociada a cada una de las ondas estacionarias (modos de radiación) un valor igual a k_BT, que resulta de la suma de las energías promedio correspondientes a los campos eléctrico y magnético, cada una de ellas igual a $1/2k_BT$. Recuérdese en este sentido que la energía promedio de un oscilador armónico

[4] La constante k_B está relacionada con la constante R de los gases perfectos y con el número de Avogrado N_A mediante la relación $k_B = R/N_A$.

© Ediciones Pirámide

(igual a $k_B T$) es la suma de la energía cinética media ($1/2 k_B T$) y la energía potencial media ($1/2 k_B T$) de dicho oscilador.

La densidad espectral de energía $\rho(\nu, T)$ de la radiación se obtendrá, por tanto, multiplicando la cantidad $k_B T$ por el número de modos por unidad de volumen, N_ν, en el intervalo de frecuencias ν, $\nu + d\nu$ contenidos en la cavidad. Este cálculo fue finalizado por Jeans a partir del procedimiento señalado por Rayleigh, por eso la expresión resultante se denominó fórmula de Rayleigh-Jeans. Vamos, pues, a determinar el número de modos de la radiación.

Como, según vimos, la función $\rho(\nu, T)$ es independiente de la forma y naturaleza de las paredes de la cavidad, por comodidad elegiremos una cavidad con forma de paralelepípedo de paredes metálicas perfectamente conductoras (véase figura 1.6).

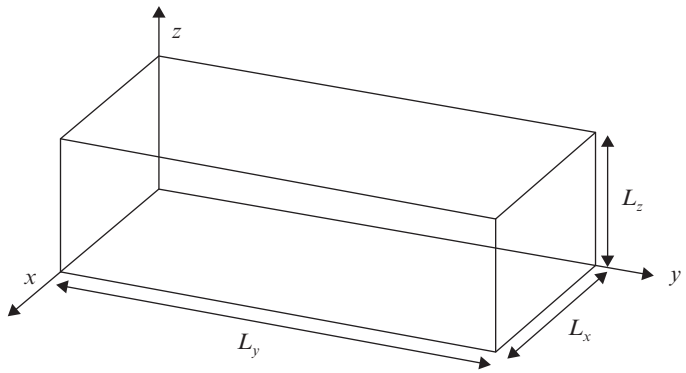


Figura 1.6. Diagrama ilustrativo de la cavidad elegida para el cálculo del número de modos de radiación. Las paredes son paralelas a los ejes de coordenadas, y sobre ellas las ondas se anulan.

El vector campo eléctrico $\boldsymbol{E}$ dentro de dicha cavidad verificará la ecuación de ondas en el vacío. Si consideramos, por ejemplo, su componente según el eje x, podremos escribir, por tanto,

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2} \qquad [1.5.1]$$

siendo c la velocidad de la luz en el vacío.

Para resolver [1.5.1] haremos uso del método de separación de variables, ensayando una solución de la forma

$$E_x = X(x)\,Y(y)\,Z(z)\,T(t) \qquad [1.5.2]$$

Sustituyendo [1.5.2] en [1.5.1], y dividiendo entre E_x, nos queda

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2} + \frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2} + \frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2} = \frac{1}{c^2 T}\frac{d^2T}{dt^2} \qquad [1.5.3]$$

© Ediciones Pirámide

en donde se han escrito derivadas totales en lugar de parciales debido a que cada una de las funciones X, Y, Z y T depende de una sola variable. Ahora bien, el miembro de la izquierda en [1.5.3] depende de variables espaciales, mientras que el de la derecha es función solamente del tiempo. La única forma de hacer compatible ambas situaciones es igualar ambos miembros a una constante, que designaremos por conveniencia $-k^2$. La expresión [1.5.3] se dividirá, pues, en las dos ecuaciones siguientes:

$$\frac{1}{X}\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{Y}\frac{\mathrm{d}^2Y}{\mathrm{d}y^2} = -k^2 - \frac{1}{Z}\frac{\mathrm{d}^2Z}{\mathrm{d}z^2} \qquad [1.5.4.a]$$

$$\frac{1}{c^2T}\frac{\mathrm{d}^2T}{\mathrm{d}t^2} = -k^2 \qquad [1.5.4.b]$$

Si observamos ahora la ecuación [1.5.4.*a*], vemos que de nuevo el miembro de la izquierda depende de variables distintas que el de la derecha, por lo que podemos repetir el mismo razonamiento que antes, y así sucesivamente hasta obtener el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\frac{1}{X}\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}x^2} = -k_x^2 \qquad [1.5.5.a]$$

$$\frac{1}{Y}\frac{\mathrm{d}^2Y}{\mathrm{d}y^2} = -k_y^2 \qquad [1.5.5.b]$$

$$\frac{1}{Z}\frac{\mathrm{d}^2Z}{\mathrm{d}z^2} = -k_z^2 \qquad [1.5.5.c]$$

$$\frac{1}{c^2T}\frac{\mathrm{d}^2T}{\mathrm{d}t^2} = -k^2 \qquad [1.5.5.d]$$

donde k_x, k_y y k_z son constantes ligadas por la condición

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \qquad [1.5.6]$$

La resolución de [1.5.5.*d*] proporciona la dependencia temporal de E_x[5]:

$$T(t) = A \text{ sen } (kct) = A \text{ sen } \omega t \qquad [1.5.7]$$

donde hemos hecho $\omega = ck$ y A es un número arbitrario. A la vista de [1.5.7] se deduce que la constante ω representa la frecuencia angular de la onda solución de [1.5.5.*d*], y, por tan-

[5] También podíamos haber tomado como solución de [l.5.5.*d*] una de tipo cosenoidal $T = A \cos \omega t$. Tal elección es irrelevante con respecto a la dependencia temporal, pero no ocurre así si se considera la depedencia espacial, como se pondrá de manifiesto a continuación.

© Ediciones Pirámide

to, del vector campo eléctrico $\boldsymbol{E}$, ya que la ecuación [1.5.5.*d*] es la misma para las otras dos componentes E_y y E_z. La constante k representará el número de onda asociado, verificándose las relaciones bien conocidas $\omega = 2\pi\nu$ y $k = 2\pi/\lambda$, donde ν y λ denotan, respectivamente, la frecuencia y la longitud de onda del modo de radiación que estamos considerando.

Por otro lado, cuando un campo eléctrico incice sobre una pared metálica vibrando paralelamente a su superficie, se genera un movimiento de cargas que lo neutraliza, anulándolo. Esto equivale a decir que, en todo instante, sobre los planos $y = 0$, $y = L_y$, $z = 0$ y $z = L_z$, el campo E_x debe valer cero. Esta restricción obliga a que, de entre las dos soluciones en principio posibles (senoidal o cosenoidal) de las ecuaciones [1.5.5.*b*] y [1.5.5.*c*], podamos aceptar únicamente las de tipo senoidal. Un razonamiento similar puede aplicarse a las otras dos componentes E_y y E_z. Por otra parte, dado que el interior de la cavidad es una región libre de corrientes y cargas, el campo eléctrico $\boldsymbol{E}$ deberá satisfacer la ecuación[6]:

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \qquad [1.5.8]$$

Haciendo uso de la ecuación anterior y teniendo en cuenta la anulación sobre las paredes de la cavidad de las correspondientes componentes tangenciales, se obtienen, finalmente, las siguientes expresiones para las *ondas estacionarias* que representan los *modos de radiación:*

$$E_x = E_{0x} \cos k_x x \operatorname{sen} k_y y \operatorname{sen} k_z z \operatorname{sen} \omega t \qquad [1.5.9.a]$$

$$E_y = E_{0y} \operatorname{sen} k_x x \cos k_y y \operatorname{sen} k_z z \operatorname{sen} \omega t \qquad [1.5.9.b]$$

$$E_z = E_{0z} \operatorname{sen} k_x x \operatorname{sen} k_y y \cos k_z z \operatorname{sen} \omega t \qquad [1.5.9.c]$$

cumpliéndose además (según se desprende de las condiciones de anulación)

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L_x} \;\; ; \;\; k_y = \frac{n_y \pi}{L_y} \;\; ; \;\; k_z = \frac{n_z \pi}{L_z} \qquad [1.5.10]$$

donde n_x, n_y y n_z son números enteros no negativos. En las ecuaciones [1.5.9] E_{0x}, E_{0y} y E_{0z} son constantes que satisfacen, según se desprende de [1.5.8], la condición de transversalidad $\boldsymbol{E}_0 \times \boldsymbol{k} = 0$, siendo $\boldsymbol{E}_0 = (E_{0x}, E_{0y}, E_{0z})$ y $\boldsymbol{k} = (k_x, k_y, k_z)$. El vector $\boldsymbol{E}_0$ expresa, de hecho, una de las características fundamentales de la radiación electromagnética como es la *polarización.*

De todo lo anterior se deriva una consecuencia fundamental: cada uno de los modos de radiación existentes en la cavidad lleva asociado una triada n_x, n_y, n_z. Por otra parte, la relación [1.5.6] puede escribirse en la forma

$$\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} = \frac{4}{\lambda^2} = \frac{4\nu^2}{c^2} \qquad [1.5.11]$$

[6] Se trata de una de las ecuaciones fundamentales del electromagnetismo, conocidas universalmente como ecuaciones de Maxwell, en honor al físico británico que las estableció.

© Ediciones Pirámide

En otras palabras, las frecuencias permitidas de los modos de radiación son aquellas que obedecen la igualdad anterior. Volviendo a nuestro problema de recuento, tendremos que determinar el número de modos *diferentes* que existen en la cavidad en el intervalo de frecuencias v, $v + dv$. Tal número deberá obtenerse de las ecuaciones [1.5.9] teniendo en cuenta las posibles combinaciones de los números n_x, n_y y n_z compatibles con [1.5.11], así como las diferentes polarizaciones del campo (expresadas por E_{0x}, E_{0y} y E_{0z}). Ahora bien, es un hecho conocido en Óptica que a cada dirección de propagación únicamente pueden asociarse *dos* polarizaciones *independientes* (ortogonales). Consideremos entonces la figura 1.7, en la cual hemos representado la ecuación [1.5.11] tomando los valores de n_x, n_y y n_z como coordenadas de cada modo según tres ejes cartesianos. Fijado v, la ecuación [1.5.11] es la ecuación de un elipsoide con semiejes $2vL_x/c$, $2vL_y/c$ y $2vL_z/c$. El volumen de un octante de dicho elipsoide (correspondiente a los valores no negativos de n_x, n_y y n_z) valdrá, en consecuencia,

$$\frac{1}{8}\frac{4}{3}\pi\left(\frac{2vL_x}{c}\right)\left(\frac{2vL_y}{c}\right)\left(\frac{2vL_z}{c}\right) = \frac{4\pi v^3}{3c^3}V \qquad [1.5.12]$$

siendo V el volumen total de la cavidad. Pero el volumen dado por [1.5.12] (a falta de un factor 2 que tenga en cuenta las dos polarizaciones independientes asociadas a cada triada n_x, n_y y n_z del interior del elipsoide) nos proporciona justamente el número de modos de la cavidad con frecuencias menores que la v dada, ya que a cada cubo de lado unidad le corresponde precisamente un modo. En consecuencia, el número total de ondas estacionarias con frecuencias inferiores a v será el doble que el dado por [1.5.12], es decir,

$$\frac{8\pi v^3}{3c^3}V \qquad [1.5.13]$$

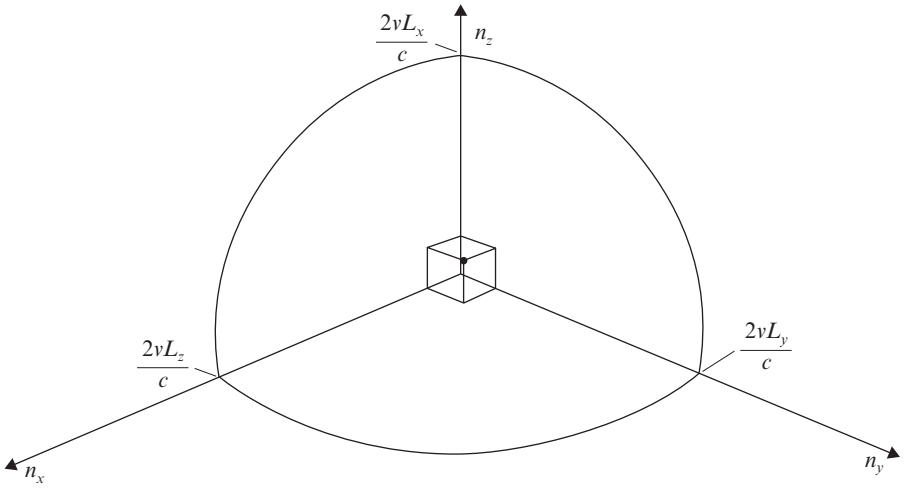


Figura 1.7. Representación de un octante del elipsoide dado por [1.5.11]. El punto señalado en el vértice del cubo de lado unidad tiene de coordenadas $n_x = n_y = n_z = 1$.

© Ediciones Pirámide

Como estamos interesados en determinar cuántos modos por unidad de volumen se encuentran en el intervalo de frecuencias v, $v + dv$, bastará diferenciar [1.5.13] respecto de v y dividir entre el volumen total V, obteniéndose para N_v

$$N_v = \frac{8\pi v^2}{3c^3} \qquad [1.5.14]$$

Por tanto, la densidad espectral de energía $\rho(v, T)$ de la radiación en equilibrio térmico con las paredes de una cavidad valdrá

$$\rho(v, T) = \frac{8\pi v^2}{c^3} k_B T \qquad [1.5.15]$$

que constituye la *fórmula de Rayleigh-Jeans* para la distribución espectral de energía del cuerpo negro. Aunque a bajas frecuencias dicha expresión guarda un buen acuerdo con los experimentos, sin embargo, la dependencia cuadrática con la frecuencia predice una cada vez mayor cantidad de energía radiada conforme aumentamos la frecuencia. Esto comportaría, por ejemplo, que seriamos abrasados por la radiación de rayos X emitida por cualquier horno o pedazo de hierro incandescente, lo cual, evidentemente, no ocurre (véase figura 1.8). El anterior resultado, en flagrante contradicción con lo observado, fue denominado por uno de los padres de la teoría cuántica, P. S. Ehrenfest, la «catástrofe ultravioleta» de la teoría clásica de la radiación, en alusión a la enorme divergencia entre las curvas de la figura 1.8 para frecuencias en el rango del ultravioleta y superiores. La física clásica, por tanto, resultó incapaz de proporcionar una explicación rigurosa o incluso cualitativa del espectro de radiación del cuerpo negro, y la determinación de la forma explícita de la función $f(v/T)$ de la ley de Wien siguió siendo un problema abierto. Es interesante señalar, finalmente, que la fórmula de Rayleigh-Jeans puede también obtenerse, salvo constante de proporcionalidad, mediante análisis dimensional (véase ejercicio 1.3).

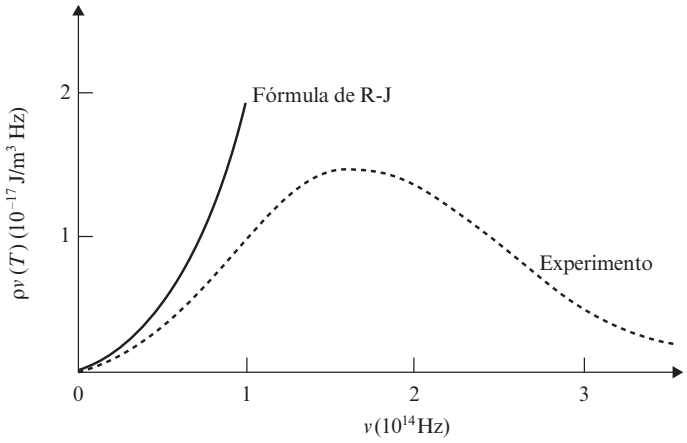


Figura 1.8. Comparación de las previsiones de la fórmula de Rayleigh-Jeans con los resultados experimentales: catástrofe ultravioleta.

© Ediciones Pirámide

1.6. FÓRMULA DE PLANCK

En 1896, Wien propuso una expresión de tipo exponencial para la función $f(\nu/T)$:

$$f(\nu/T) = \alpha e^{-\beta\nu/T} \qquad [1.6.1]$$

donde α y β eran constantes independientes de ν a ajustar con los datos experimentales. La ecuación [1.6.1] fue deducida por Wien admitiendo que la distribución espectral de la radiación del cuerpo negro era análoga a la distribución de Maxwell para las velocidades de las moléculas de un gas. Aunque la concordancia de [1.6.1] con los experimentos era buena para frecuencias elevadas, sin embargo, las discrepancias se hacían evidentes en el resto del espectro. Fue Planck quien, en 1900, dio el paso decisivo en la obtención de la fórmula correcta de $f(\nu/T)$.

En su modelo de cuerpo negro, Planck asimiló los átomos que constituían las paredes de la cavidad a cargas moviéndose como osciladores lineales, los cuales interaccionaban intercambiando energía con la radiación térmica existente en el interior de dicha cavidad. Esto encajaba perfectamente con la electrodinámica clásica y la teoría de la emisión y absorción de radiación por dipolos oscilantes desarrollada por Hertz. De hecho, igualando las tasas de emisión y absorción de los osciladores elementales de Planck, éste dedujo la siguiente expresión para $\rho(\nu, T)$:

$$\rho(\nu/T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} E(\nu, T) \qquad [1.6.2]$$

donde $E(\nu, T)$ representa la energía promedio de tales osciladores. Es importante señalar aquí que, en la situación que estamos considerando de equilibrio térmico entre la radiación y las paredes de la cavidad que la contiene, la frecuencia que aparece en [1.6.2] posee un doble significado físico: por un lado, puede interpretarse como la frecuencia de vibración de los osciladores de la pared, y por otro como la frecuencia correspondiente a uno de los modos de radiación. En este sentido téngase en cuenta que *el concepto generalizado de oscilador (monodimensional) se refiere a cualquier sistema físico cuya coordenada generalizada sea una función sinusoidal del tiempo*[7].

Obsérvese también que el coeficiente que multiplica a $E(\nu, T)$ en [1.6.2] es el mismo que el deducido por Rayleigh-Jeans para el número de modos N_ν (véase [1.5.14]), el cual fue obtenido mediante argumentos generales de tipo geométrico. Esto refuerza, por tanto, la impresión de que el valor obtenido para dicho recuento es el correcto.

Basándose en ecuaciones fundamentales de la Termodinámica, y haciendo uso de la fórmula [1.6.1], Planck comprobó que se cumplían las siguientes relaciones en los casos límites de las altas y bajas frecuencias:

[7] Por coordenada generalizada se entiende cualquier magnitud capaz de describir la situación instantánea del oscilador. Así, la distancia a la posición de equilibrio en el caso de un muelle, el ángulo de giro si se trata de un péndulo, o la amplitud del campo eléctrico en el caso de un modo de radiación, son ejemplos de coordenadas generalizadas correspondientes a sistemas equivalentes oscilatorio-armónicos.

© Ediciones Pirámide

$$\frac{d^2S}{dE^2} \propto 1/E \quad , \quad \text{(altas frecuencias)} \qquad [1.6.3.a]$$

$$\frac{d^2S}{dE^2} \propto 1/E^2 \quad , \quad \text{(bajas frecuencias)} \qquad [1.6.3.b]$$

donde el símbolo $\propto$ significa proporcionalidad, y S denota la entropía de los supuestos osciladores.

El concepto de entropía fue introducido por Clausius en 1865. Se trata de una magnitud característica del estado del sistema cuyo valor depende de las variables que especifican dicho estado (presión, volumen, composición, etc.). En Termodinámica de los procesos reversibles se define en forma infinitesimal como $dS = dQ/T$, donde dQ denota la variación de calor involucrada en el proceso. En una transformación irreversible, sin embargo, siempre se cumple $dS > dQ/T$. Una consecuencia fundamental de esta desigualdad se deduce al considerar sistemas aislados térmicamente. En ellos $dQ = 0$, lo que implica $dS > 0$, es decir, la entropía aumenta por el mero hecho de haberse efectuado la transformación. La entropía representa, pues, el «contenido de transformación» de un cuerpo. De hecho, del segundo principio de la termodinámica se desprende que las transformaciones en la naturaleza (irreversibles) comportan siempre un aumento de entropía. Dicho aumento puede servir como medida de la pérdida global de orden (o aumento de desorden) que acompaña a los procesos naturales. No profundizaremos más aquí sobre este punto ya que será retomado más adelante.

La idea capital de Planck fue interpolar las fórmulas [1.6.3] reuniéndolas en una sola que resultara aplicable a ambos rangos espectrales a la vez. La expresión propuesta fue

$$\frac{d^2S}{dE^2} = -\frac{1}{E(a+E)} \qquad [1.6.4]$$

donde a es una constante independiente de T, pero dependiente de la frecuencia. Imponiendo ahora la compatibilidad de [1.6.4] con el comportamiento de E a bajas frecuencias, en el límite $T \to \infty$, se llega, tras algunos cálculos, a la expresión

$$E = \frac{a}{e^{a/T} - 1} \qquad [1.6.5]$$

y la densidad espectral de energía valdrá

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{a\nu^2}{e^{a/T} - 1} \qquad [1.6.6]$$

Finalmente, imponiendo la ley de Wien [1.4.1], se encuentra que a debe depender linealmente de la frecuencia, es decir, $a = A\nu$, con lo que tendremos para la función $f(\nu, T)$ buscada

$$f(\nu, T) = \frac{1}{e^{A\nu/T} - 1} \qquad [1.6.7]$$

© Ediciones Pirámide

El acuerdo de esta fórmula[8], con los precisos datos experimentales obtenidos en 1900 por Rubens y Kurlbaum, fue completo. Desde entonces, todas las comprobaciones experimentales posteriores confirmaron la extraordinaria bondad de la ecuación [1.6.7]. Sin embargo, no por ello dejaba de ser una fórmula empírica, determinada mediante tanteo. Era preciso, pues, encontrar los fundamentos teóricos que permitieran su deducción rigurosa. De ello nos ocuparemos a continuación.

1.7. TEORÍA DE PLANCK DEL CUERPO NEGRO: DEDUCCIÓN DE LA FÓRMULA DE PLANCK

En su deducción de la función $\rho(v, T)$ Planck abandonó la termodinámica y se apoyó en la interpretación estadística del concepto de entropía, que había sido introducida por Boltzmann años atrás. Su argumentación puede resumirse como sigue (para más detalles, el lector interesado puede consultar, por ejemplo, el libro de Cropper citado en la bibliografia).

Supongamos que las paredes de la cavidad que conforma el cuerpo negro contienen N osciladores cuyas energía promedio y entropía promedio son, respectivamente, E y S. En tal caso, la energía y la entropía totales, E_T y S_T, del conjunto de osciladores, esto es, de las paredes de la cavidad, valdrán[9]

$$E_T = NE \qquad [1.7.1.a]$$

$$S_T = NS \qquad [1.7.1.b]$$

Por otro lado, de acuerdo con el formalismo estadístico de Boltzmann, S_T puede escribirse como[10]

$$S_T = k_B \ln W \qquad [1.7.2]$$

donde W es una cierta función probabilística que mide el número de formas en que la energía total del sistema de osciladores, supuesta fija, puede distribuirse energéticamente entre los osciladores individuales.

Conviene distinguir entre estado macroscópico y estado microscópico de un cuerpo o sistema. El primero está determinado por variables termodinámicas como son su temperatura, volumen, energía interna, etc. Tales parametros caracterizan al sistema de forma global, macroscópica. El estado microscópico se refiere al conjunto de situaciones dinámicas de cada uno de los elementos que integran el cuerpo (átomo, molécula, iones, etc.). A un mismo estado macros-

[8] Para un valor concreto de A obtenido por ajuste.

[9] Recuérdese que la entropía, al igual que la energía, la masa o la carga eléctrica, entre otras, es una variable extensiva, es decir, es aditiva respecto de las partes de un sistema. Otras magnitudes como la temperatura o la densidad no gozan de esta propiedad, y suelen denominarse intensivas.

[10] El símbolo «ln» significa logaritmo neperiano.

© Ediciones Pirámide

cópico le puede corresponder, evidentemente, un gran número de situaciones microscópicas diferentes. A este número le hemos designado por W en la ecuación [1.7.2]. Si admitimos entonces que todos los estados microscópicos asociados a un cierto estado macroscópico son igualmente probables, entonces la cantidad adimensional W es un índice de la probabilidad relativa de ocurrencia del mencionado estado macroscópico respecto del resto de estados macroscópicos posibles. En otras palabras, cuanto mayor sea el número de combinaciones de estados microscópicos que dan lugar a un cierto estado macroscópico, tanto más probable será éste.

Basándonos en lo anterior, puede enunciarse la hipótesis fundamental de la mecánica estadística, a saber, que todo sistema evoluciona espontáneamente hacia el estado en el cual W es máxima. A partir de este principio no es difícil inferir que la W máxima se alcanza en los estados macroscópicos correspondientes al equilibrio. Por otro lado, es bien conocido en termodinámica que la entropía siempre aumenta en las transformaciones naturales, siendo máxima en la situación de equilibrio. De ambos hechos parece desprenderse la consecuencia de que la entropía S y la probabilidad W deben guardar una estrecha relación. A fin de establecer esta conexión consideremos dos sistemas con entropías, S_1 y S_2 . Recordando que S es una magnitud extensiva, la entropía del conjunto será entonces $S_1 + S_2$. Al mismo tiempo, es bien sabido que la probabilidad de ocurrencia conjunta W de dos sucesos independientes viene dada por el producto de las probabilidades de ocurrencia de cada uno de ellos por separado W_1 y W_2. Esto equivale en nuestro caso a afirmar que $W = W_1 W_2$. Si escribimos $S = f(W)$, la función f deberá satisfacer la ecuación $f(W_1 W_2) = f(W_1) + f(W_2)$; por tanto, debe ser de tipo logarítmico en W. Fue Boltzmann quien, en 1877, planteó esta relación entre la entropía y la función de probabilidad en la forma mostrada en la ecuación [1.7.2]. Un aumento de ambas magnitudes indicará, por tanto, un mayor grado de desorden. Es importante señalar, finalmente, que la ecuación [1.7.2] constituye de hecho el nexo de unión entre los sistemas macroscópicos y el mundo atómico subyacente. Una consecuencia fundamental de esto se halla en la deducción de la fórmula de Planck que habíamos comenzado a analizar.

Para distribuir de forma fácilmente evaluable la energía total entre los osciladores, supondremos, al menos en principio, que E_T es un múltiplo de una cantidad *discreta* de energía que designaremos por ε. Una vez efectuado el recuento de las posibles distribuciones, tomaremos el límite cuando ε tiende a cero. Escribiremos, pues,

$$E_T = n\varepsilon \qquad [1.7.3]$$

Como el número de osciladores es N, el cálculo de W es equivalente a la determinación del número de formas de distribuir n unidades indivisibles de energía entre los N osciladores. Podemos representar simbólicamente esta situación asociando los osciladores a compartimentos, cada uno de los cuales ocupado por un cierto número de unidades de energía. En la figura 1.9 se muestra a modo de ejemplo el caso $N = 4$, $n = 10$. En ella la separación entre los distintos compartimentos se representa mediante barras verticales. Para $N = 4$ el número de tales barras será $N - 1 = 3$.

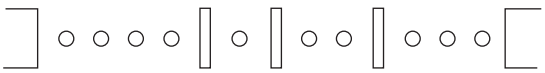


Figura 1.9. Representación simbólica de una de las distribuciones posibles de 10 unidades de energía (pequeños círculos) en 4 osciladores (compartimentos separados por barras verticales).

© Ediciones Pirámide

A la vista de la figura 1.9 se infiere que, fijada E_T, y por tanto n, el número de formas de distribuir n círculos en los N compartimentos será justamente igual al número total de permutaciones de los $(N - 1) + n$ objetos (barras + círculos), es decir,

$$(N + n - 1)! \qquad [1.7.4]$$

Ahora bien, los círculos que simbolizan las unidades de energía son idénticos entre sí, al igual que ocurre con las barras, por lo que, de acuerdo con la teoría de probabilidades, el número dado por [1.7.4] habrá que dividirlo entre el número de permutaciones de los círculos entre sí, multiplicado por el número de permutaciones de las barras, y nos quedará

$$\frac{(N + n - 1)}{n!(N - 1)!} \qquad [1.7.5]$$

que nos dará la función W buscada. Dado que los números N y n son enormemente grandes, podemos sustituir la expresión anterior por la ecuación

$$W = \frac{(N + n)!}{n!\, N!} \qquad [1.7.6]$$

y teniendo en cuenta la fórmula de Stirling[11]

$$\ln (x!) \simeq x \ln x - x \qquad [1.7.7]$$

válida para $x \gg 1$, obtenemos para S_T, a partir de [1.7.2]:

$$\begin{aligned} S_T &= k_B \ln W = k_B[(N + n) \ln (N + n) - n \ln (n) - N \ln N] = \\ &= Nk_B\left\{\left(1 + \frac{n}{N}\right) \ln \left[N\left(1 + \frac{n}{N}\right)\right] - \left(\frac{n}{N}\right) \ln (n) - \ln N\right\} = \\ &= Nk_B\left[\left(1 + \frac{n}{N}\right) \ln \left(1 + \frac{n}{N}\right) - \left(\frac{n}{N}\right) \ln \left(\frac{n}{N}\right)\right] = \\ &= Nk_B\left[\left(1 + \frac{E}{\varepsilon}\right) \ln \left(1 + \frac{E}{\varepsilon}\right) - \left(\frac{E}{\varepsilon}\right) \ln \left(\frac{E}{\varepsilon}\right)\right] \end{aligned} \qquad [1.7.8]$$

[11] Un desarrollo asintótico de $\ln (x!)$ es

$$\ln x! = x \ln x - x + \ln \sqrt{2\pi x} + \ln \left(1 + \frac{1}{12x} + \frac{1}{288x^2} - \cdots\right)$$

Cuando $x \gg 1$, nos queda la fórmula de Stirling.

© Ediciones Pirámide

En la última igualdad de [1.7.8] hemos hecho uso de la relación

$$E_T = NE = n\varepsilon \qquad [1.7.9]$$

deducida igualando [1.7.1.*a*] y [1.7.3]. De [1.7.1.*b*] se tendrá para la entropía promedio de un oscilador

$$S = k_B\left[\left(1+\frac{E}{\varepsilon}\right)\ln\left(1+\frac{E}{\varepsilon}\right) - \left(\frac{E}{\varepsilon}\right)\ln\left(\frac{E}{\varepsilon}\right)\right] \qquad [1.7.10]$$

Ahora bien, en el equilibrio se cumple la ecuación termodinámica fundamental (a volumen constante)[12]

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}E} = \frac{1}{T} \qquad [1.7.11]$$

que aplicada a [1.7.10] nos da[13]

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}E} = \left(\frac{k_B}{\varepsilon}\right)\ln\left[\left(1+\frac{E}{\varepsilon}\right)\Big/\left(\frac{E}{\varepsilon}\right)\right] = \frac{1}{T} \qquad [1.7.12]$$

Despejando la energía promedio E de la expresión anterior nos queda

$$E(v,T) = \frac{\varepsilon}{e^{\varepsilon/k_BT} - 1} \qquad [1.7.13]$$

Conviene hacer notar aquí que, aunque la ecuación [1.7.13] se ha deducido en la hipótesis de que las paredes de la cavidad están constituidas por osciladores armónicos, sin embargo, recordando el argumento termodinámico de Kirchhoff, el valor de la energía promedio E que obtengamos finalmente será correcto con carácter general.

La ecuación [1.7.13] debe ser compatible con la ley de Wien [1.4.1] y con la expresión general [1.6.2], es decir, la energía E debe ser de la forma

$$E(v,T) = \frac{c^3}{8\pi}\, vf(v/T) \qquad [1.7.14]$$

Comparando [1.7.13] y [1.7.14], se infiere

$$\varepsilon \propto v \qquad [1.7.15]$$

[12] Volveremos sobre esta ecuación en el capítulo 16.

[13] Obsérvese que T designa, como siempre, la temperatura de la cavidad, no una temperatura asociada a cada oscilador individual.

© Ediciones Pirámide

que escribiremos en la forma

$$\varepsilon = h\nu \qquad [1.7.16]$$

donde h es la llamada constante de Planck, cuyo valor resulta ser 6.626×10^{-34} J · s. La expresión anterior constituye la ecuación fundamental que marca el inicio del desarrollo de la teoría cuántica. En ella se pone de manifiesto de forma evidente el carácter discreto de la energía de un sistema físico oscilatorio armónico: En efecto, fijada ν, ε es una cantidad *finita,* y no puede hacerse tender a cero como suponíamos en nuestro planteamiento inicial. En consecuencia, de acuerdo con [1.7.3], cada uno de los osciladores elementales podrá tener a la sumo n unidades indivisibles de energía *(cuantos de energía)* y como mínimo cero. Los valores de la energía que puede poseer un oscilador elemental serán, por tanto,

$$nh\nu \quad , \quad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad [1.7.17]$$

Esta cuantificación de la energía de un sistema oscilatorio armónico es igualmente aplicable a cualquier sistema oscilatorio armónico lineal generalizado, es decir, a cualquier sistema físico cuya única coordenada generalizada sea una función sinusoidal del tiempo.

Volviendo a la ecuación [1.7.13], la expresión de la energía promedio $E(\nu, T)$ queda, por tanto, como sigue:

$$E(\nu, T) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \qquad [1.7.18]$$

y la densidad espectral de energía del cuerpo negro toma, finalmente, la forma (recuérdese [1.6.2]):

$$\rho(\nu, T) = \left(\frac{8\pi\nu^2}{c^3}\right) \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \qquad [1.7.19]$$

que es precisamente la fórmula semiempírica obtenida anteriormente por Planck. Naturalmente, su comportamiento a bajas frecuencias sigue la fórmula propuesta por Rayleigh-Jeans (véase ejercicio 1.4). Asimismo, integrando $\rho(\nu, T)$ para todas las frecuencias, resulta la ley de Stefan-Boltzmann, en la cual la constante σ queda expresada ahora en términos de k_B y h (véase ejercicio 1.5). Por otro lado, hallando el máximo de la función $\rho(\nu, T)$, se encuentra la ley de desplazamiento de Wien, cuya constante puede obtenerse explícitamente a partir de los valores de h y k_B (véase ejercicio 1.6).

Es interesante hacer notar que, en el límite $h \to 0$, la ecuación [l.7.19] se convierte en la ecuación [1.5.15], correcta únicamente para ν bajas, y deducida de acuerdo con el formalismo clásico plasmado en el teorema de equipartición de la energía. La finitud de h conlleva, pues, la inaplicabilidad de dicho teorema (obsérvese que la energía promedio depende de ν), y conduce, como hemos visto, a la discretización (cuantificación) de la energía para cualquier sistema oscilatorio armónico. Ningún oscilador puede, por tanto, absorber

© Ediciones Pirámide

ni emitir energía en un rango continuo, sino únicamente de manera discontinua mediante incrementos de valor hv, siendo v la frecuencia de oscilación. Es fácil comprender que esto choca completamente con las ideas tradicionales de la fisica clásica e incluso con nuestra concepción intuitiva del intercambio energético. La razón de este aparente desacuerdo con el mundo observado estriba en la pequeñez de la constante de Planck en comparación con otras cantidades macroscópias. Dicho en otras palabras, los efectos de la cuantificación de la energía se harán más evidentes cuando se consideren situaciones fisicas que involucren cantidades de energía del orden de hv. Esto ocurrirá cuando la energía del sistema sea muy pequeña o nos encontremos en el rango de las altas frecuencias, como sucede con el cuerpo negro. En los siguientes capítulos tendremos ocasión de analizar muchos otros ejemplos. No debemos olvidar, no obstante, que el postulado de Planck acerca de la cuantificación de la energía es de validez universal, incluso en situaciones perfectamente macroscópicas. Es especialmente ilustrativo en este sentido el ejercicio 1.7.

Señalemos, para terminar, que el valor concreto de la constante de Planck, h, fue determinado por él mismo a partir de las medidas experimentales de la constante de Stefan-Boltzmann y de la de Wien (véanse ecuaciones [1.4.6] y [1.4.11]). Asimismo, y teniendo en cuenta el valor de la constante R de los gases perfectos, calculó el número de Avogadro ($N_A = 6.022 \times 10^{23}$ mol^{-1}), e incluso, del valor conocido de la constante de Faraday[14], fue capaz de estimar la carga eléctrica elemental del electrón.

1.8. APLICACIÓN EN TERMOMETRÍA: PIRÓMETRO ÓPTICO

El carácter universal de la distribución espectral de energía radiada por un cuerpo negro hace de éste un buen patrón de referencia en la medida de temperaturas en termometría. La idea básica de un pirómetro óptico consiste en comparar el color de la radiación emitida por un cuerpo negro a temperatura conocida y variable a voluntad con el de otro cuerpo negro cuya temperatura desconocemos. Cuando se produzca la *igualación de colores* podrá concluirse que ambos cuerpos negros se encuentran a la misma temperatura. Este procedimiento, en apariencia muy simple, presenta, no obstante, ciertas dificultades que es necesario tener en cuenta: en la mayoría de los pirómetros ópticos se emplea el ojo humano como detector. Esto restringe su utilización a temperaturas lo bastante elevadas como para emitir dentro del rango visible con suficiente intensidad. Por otro lado, igualdad de colores no implica igualdad de composición espectral, ya que el color está estrechamente relacionado con una sensación visual, la cual depende, entre otros factores, del observador, del entorno visual, etc. Por último, no todos los cuerpos de interés en termometría pueden, evidentemente, ser considerados cuerpos negros ideales, lo que hace que deban incluirse las oportunas correcciones en los métodos de calibración y medida.

Pese a estos inconvenientes, los pirómetros ópticos son de utilidad, y resultan especialmente adecuados en la determinación de la temperatura de hornos. El esquema de un pi-

[14] Se denomina constante de Faraday la cantidad de electricidad necesaria para depositar, en una experiencia de electrolisis, un equivalente gramo (un mol dividido entre la valencia) de sustancia. Su valor es 96.485 culombios.

© Ediciones Pirámide