

POSIBILIDAD DE ABANDONO DE LOS POZOS DE POTENCIAL POR TRANSFERENCIA DE IMPULSO ANGULAR EN LINEAL

R. G. Ovejero y C. D. Sorrentino

Universidad Nacional de Salta y Universidad Nacional de La Plata.
sorrenti@venus.fisica.unlp.edu.ar

Los pozos de potencial en los movimientos confinados aparecen debido a la acción contrapuesta del potencial de interacción y el potencial centrífugo. Debido a la no conservación del impulso angular, este último es variable, lo cual produce deformaciones en la curva del potencial efectivo respecto del caso central. Estas deformaciones implican una alteración de los puntos de retroceso, lo cual da lugar a la posibilidad que, si dos pozos de potencial se encuentran separados por distancias adecuadas, la posición de un punto de retroceso de uno de ellos se ubica en una posición de energía permitida en el otro, con lo cual podría producirse el traslado del movimiento de las inmediaciones de un campo atractor hasta el otro, y al continuar la evolución se produciría el fenómeno inverso con una alternancia periódica del móvil respecto de los centros atractores. Se presenta las ecuaciones completas del movimiento y se determinan los parámetros más significativos, como por ejemplo el período de oscilación entre los pozos. Finalmente, se compara con procesos que ocurren en la naturaleza, usando como ejemplo el modelo simple del caso de H_2^+ .

The potential wells in the confined movements are generated by superposition of the interaction and centrifugal potential. Because of the non conservation of the angular momentum the centrifugal potential is variable, so that the effective potential deforms with regard to the central potential. Such deformations produce an alteration in the backwards points, and this make possible the fact that if two potential holes are separated by a suitable distance, a backward point position of one of them recedes up to a permitted position in the other one. This event enables to transfer the movement from an attractive core to the other, and continuing the evolution, the inverse process will take place with a periodic alternancy of the moving object from the neighbour of one core to the other. The complete equation of the movement are showed and the most important parameters are determined, for example the oscilation's period between the holes. Finally, we compare with a real phenomenon, the H_2^+ ion.

I. INTRODUCCIÓN

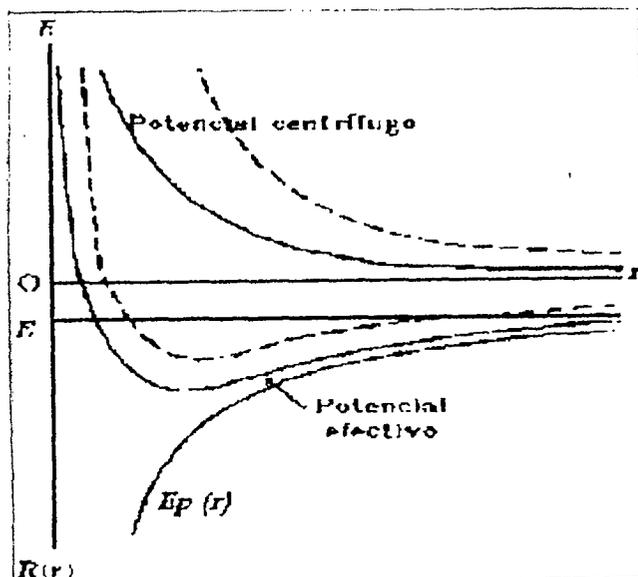
En la actualidad, hablar de las causas que originan el traslado del movimiento del electrón de las inmediaciones de un núcleo atractor a las inmediaciones del otro, en una molécula de Hidrógeno ionizada, nos conduce a realizar un análisis de las probabilidades de ocurrencia del fenómeno y promover el llamado "Efecto Tunnel", común en la Mecánica Cuántica. Nosotros vamos a intentar darle una explicación desde el punto de vista de la Mecánica Clásica, con algunos implementos más modernos (cálculo numérico, por ejemplo).

Analicemos el problema planteado por un pozo de potencial, generado por la acción contrapuesta de un potencial centrífugo y uno de interacción. Proponemos que el potencial de interacción tiene una determinada excentricidad, lo cual origina una fuerza que no es central, lo que a diferencia del caso central provoca que el movimiento no tenga más como una constante del movimiento a P_φ , sino que éste tiene un variación temporal al igual que el impulso radial P_r . La energía que tiene el electrón, viene expresada por:

$$E = \frac{P_r^2}{m} + \frac{P_\varphi^2}{2mr^2} + V'(r) \quad (1)$$

como vemos es muy similar a la expresión que corresponde al potencial central común, salvo que en este caso el impulso angular no se comporta simplemente

como una constante, sino que varía con el tiempo. Aquí debemos destacar el hecho de que debido a esta variación, el movimiento no podrá ser asemejado al que se realiza en una dimensión, como ocurre en el caso central, y vemos que la energía se descompone en la correspondiente a la parte angular y en la correspondiente a la parte radial, y cada una de estas



parte van variando en función del tiempo conforme lo hacen los correspondientes impulsos. Podemos armar el potencial efectivo como la suma de los

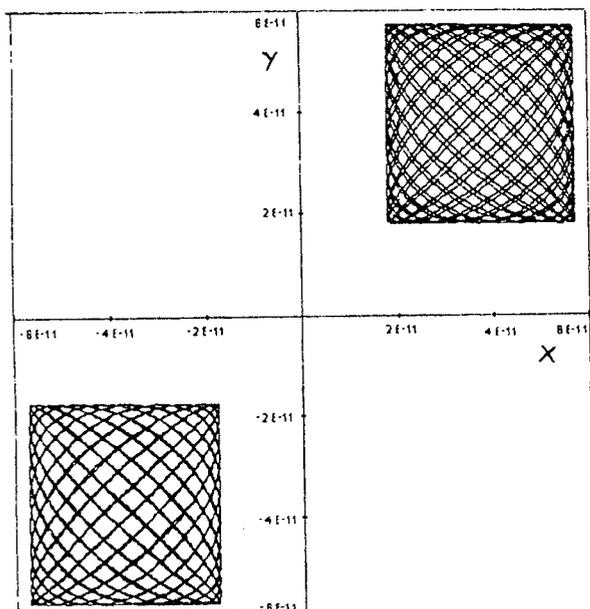
dos últimos términos de la ecuación de la energía, lo que da:

$$V^* = \frac{P^2}{2mr^2} + V'(r) \quad (2)$$

con la diferencia que éste nuevo potencial efectivo no es más constante, sino que irá variando al igual que varía el impulso en él involucrado.

II. DESCRIPCIÓN DEL MOVIMIENTO

A través del análisis de cómo va variando este potencial podemos llegar a entender porqué en un determinado momento el electrón pueda superar la barrera y en otro no. Analicemos como es el movimiento del electrón; supongamos inicialmente que el electrón tiene energía suficiente para superar la barrera de potencial. Una vez que el electrón supera la barrera de potencial, momento en el cual el impulso radial o lineal es máximo, el valor absoluto de los impulsos (angular y lineal), comienza a variar, produciéndose la disminución del impulso lineal, que en ese momento es máximo y el aumento del impulso angular que en ese momento es mínimo, hasta llegar al estado en que ambos han invertido sus condiciones extremas; así también van variando los potenciales correspondientes de forma tal que cuando el impulso lineal es máximo la energía que tiene el electrón es suficiente para superar la barrera de potencial que en ese momento es mínima, mientras que una vez que comienzan a variar los impulsos, la barrera de potencial aumenta su valor de forma tal que ya el electrón no puede superarla, como se ve en la figura N° 1.



Debido a esta variación tenemos que cuando el electrón se aproxima nuevamente a la barrera de potencial, su impulso lineal ha disminuido lo suficiente como para que le resulte imposible superar la barrera, con lo cual el electrón quedará confinado en el segundo pozo, hasta el que, debido a la variación del impulso an-

gular y del radial, este último vuelva a tener su valor máximo y le permita al electrón superar la barrera una vez que se aproxime a ella, para comenzar a realizar el mismo proceso en el otro pozo de potencial, produciéndose así una oscilación del electrón entre los dos pozos, con una frecuencia que va a estar condicionada por el valor que tenga la excentricidad del potencial, ya que es ésta la que establece el ritmo de variación que tienen los dos impulsos (cuanto mayor es la excentricidad, más rápidamente varían los impulsos y más rápidamente también, vuelven a las condiciones favorables para el salto). Por lo tanto, deberemos ajustar correctamente el valor de la excentricidad. El origen de esta excentricidad no será dado aquí, sino que intentaremos determinar su valor aproximado para conseguir que la frecuencia de oscilación del electrón entre los dos pozos de potencial sea lo más próximo posible a la frecuencia determinada experimentalmente.

III. ECUACIONES DEL MOVIMIENTO

Hasta aquí hemos venido hablando del potencial excéntrico, el cual nos da un paraboloide elíptico si graficamos la energía potencial en función de las coordenadas. Una forma alternativa y completamente equivalente de introducir la excentricidad, es considerar que tenemos un potencial central, pero que la masa tiene propiedades direccionales, es decir que tiene un determinado valor según, supongamos, la dirección X y otro valor, diferente del primero, según la dirección Y¹. Lo que debemos determinar entonces, son los valores de las dos masas para en función a ellas determinar la excentricidad. Veamos como nos quedan las ecuaciones del movimiento, ya que vamos a plantear una para las X y otra para las Y, para así poder hacer notar más fácilmente la diferencia de las masa. La ecuación que nos describe el movimiento de nuestro electrón es:

$$\vec{q} = \vec{q}_0 \cdot \cos(\omega \cdot t) \quad (3)$$

al hacer su derivadas obtenemos la velocidad y la aceleración, ésta última viene expresada por:

$$\frac{\partial^2 \vec{q}}{\partial t^2} = -\omega^2 \cdot \vec{q} \quad (4)$$

donde tenemos que q_0 es el modulo de \vec{q}_0 que es la amplitud del movimiento y ω es la frecuencia angular del mismo. Como se ve, estamos analizando al movimiento como si fuera un movimiento armónico simple, y estamos considerando que tiene sus puntos de retroceso en $\pm \vec{q}_0$, pero para un origen situado en el protón. Esto que acabamos de decir se origina debido a que se aproxima el potencial por uno parabólico, es decir se hace un desarrollado en serie de Taylor del mismo, alrededor de r_0 que será el punto en el cual el potencial tiene su valor mínimo y se toma hasta el término de segundo orden. El valor obtenido para r_0

¹ La justificación se ve en el Soporte Proyectivo de las Leyes Básicas de la Física, apartado 3.5

es:

$$r_0 = \frac{P_\varphi^2 \cdot 4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0}{m \cdot c^2} \quad (5)$$

con este valor, el desarrollo tiene como nulo al término correspondiente al primer orden y lo que queda del segundo después de hacer la evaluación en r_0 es:

$$\frac{\partial^2 V^*}{(\partial r)^2} = \frac{c^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot a_0^3} = 1556,770439 \frac{J}{m^2} = k \quad (6)$$

donde hemos utilizado el radio de Bohr $a_0 = 5.2917 \times 10^{-11} m$, la constante de permitividad del vacío $\epsilon_0 = 8.8544 \times 10^{-12} \frac{C^2}{m^2 \cdot N}$ y la carga del electrón $e = 1.60201 \times 10^{-19} C$. Con este valor: $\frac{1}{2} \frac{c^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot a_0^3} (r - r_0)^2$ vemos que el término correspondiente a la derivada segunda, puede asociarse con el potencial $V^* = \frac{k \cdot (r - r_0)^2}{2}$ que sabemos que es la forma que tiene el potencial de un oscilador armónico simple, de ahí la ecuación de movimiento propuesta para el análisis posterior. Para realizar la descomposición según los dos ejes, vamos a considerar que el movimiento total se realiza en una dirección que forma un ángulo de cuarenta y cinco grados con los ejes de forma tal que sus componentes serán iguales en módulo pero con distintas direcciones. Los dos valores de las masas serán:

$$m_x = \frac{m}{2 \cdot \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}, \quad (7)$$

$$m_y = \frac{m}{2 \cdot \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (8)$$

donde m , es la masa en reposo del electrón y θ es el ángulo existente entre los ejes del espacio de configuración², cuyo valor viene determinado por:

²Ver el Soporte Projectivo de las Leyes Básicas de la Física, apartado 3.5.1

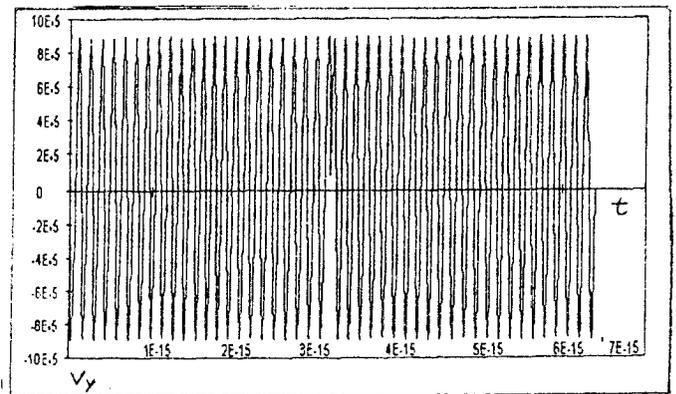
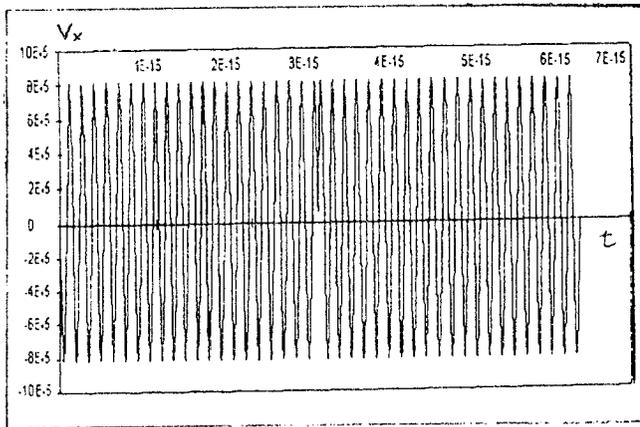
$$\frac{k'}{k + k'} = \cos(\theta) \quad (9)$$

donde k es el valor de la constante de interacción y k' nos da idea de la excentricidad. Con estos valores de las masas tendremos las siguientes ecuaciones de movimiento:

$$a_x = -q_1 \cdot \omega_1^2 \cdot \cos(\omega_1 \cdot t) \quad (10)$$

$$a_y = -q_2 \cdot \omega_2^2 \cdot \cos(\omega_2 \cdot t) \quad (11)$$

donde $q_1 = q_0 \cos \frac{\pi}{4}$ y donde $\omega_1 = \left(\frac{k+k'}{m_x}\right)^{\frac{1}{2}}$ y $\omega_2 = \left(\frac{k+k'}{m_y}\right)^{\frac{1}{2}}$. Con esto, podemos decir que tenemos todo lo que nos hace falta para poder comenzar a evaluar los distintos valores de k' para ir analizando las diferentes excentricidades. Los valores que figuran para las diferentes frecuencias (ω_1, ω_2) son los que produjeron el período de oscilación más próximo al determinado experimentalmente. Vamos a pedir que la energía del electrón esté en un determinado rango, dado que, lo que queremos, es que el electrón tenga energía suficiente para superar la barrera, pero que ésta no sea demasiado grande, como para que, de acuerdo a la variación de los impulsos, podamos hacer que el impulso radial disminuya lo suficiente, en el tiempo que le lleva al electrón en recorrer una órbita, como para que no le alcance para superarla cuando se aproxime



nuevamente a la barrera. La energía límite para el confinamiento es:

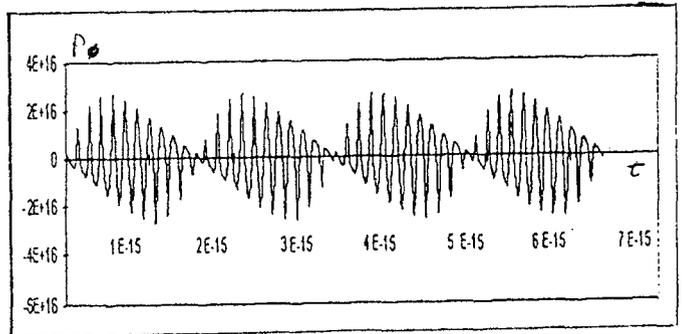
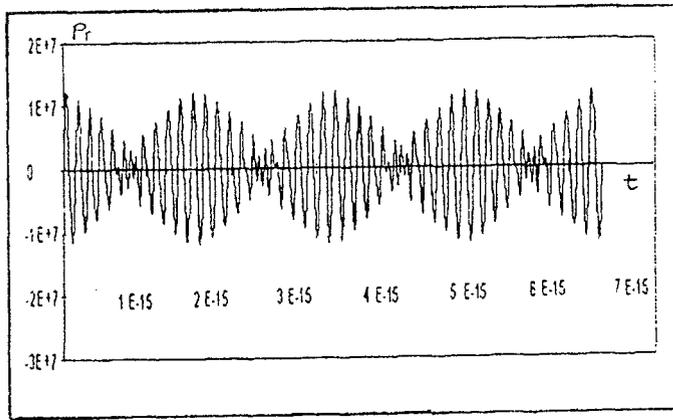
$$E_c = -4.9114449 \times 10^{-19} J \quad (12)$$

Por lo tanto, si tomamos una energía levemente superior estaremos cumpliendo nuestro objetivo. Así le daremos al electrón una energía inicial igual a:

$$E_i = -4.9081163 \times 10^{-19} J \quad (13)$$

IV. ANALISIS DE LOS RESULTADOS

Acá mostramos las gráficas de X e Y, de las velocidades y de los correspondientes impulsos con una excentricidad equivalente al 10%, es decir que si nuestro $k = 1556.770439 \frac{1}{m^2}$, nuestro $k' = 155.66770439 \frac{1}{m^2}$. Esto nos originará unas masas iguales a: $m_x = 1.002001 \times 10^{-30} Kg$ y $m_y = 8.3500082 \times 10^{-31} Kg$, que a su vez originarán las siguientes frecuencias angulares de oscilación: $\omega_1 = 4.1340388 \times 10^{16} Hz$ y $\omega_2 = 4.5286126 \times 10^{16} Hz$. El período que se obtuvo con esta excentricidad es bastante más chico que el que se obtiene experimentalmente, pero esto se debe a que la excentricidad que hemos puesto es demasiado grande y ha sido considerada solamente con fines de poder mostrar gráficos más adecuados, posteriormente será ajustada para intentar mejorar el resultado. Hay que destacar, que en ambos pozos de potencial, el movimiento debería ser el mismo, es decir la cantidad de líneas que presentan las gráficas para ambos casos deberían ser las mismas, y es esto lo que



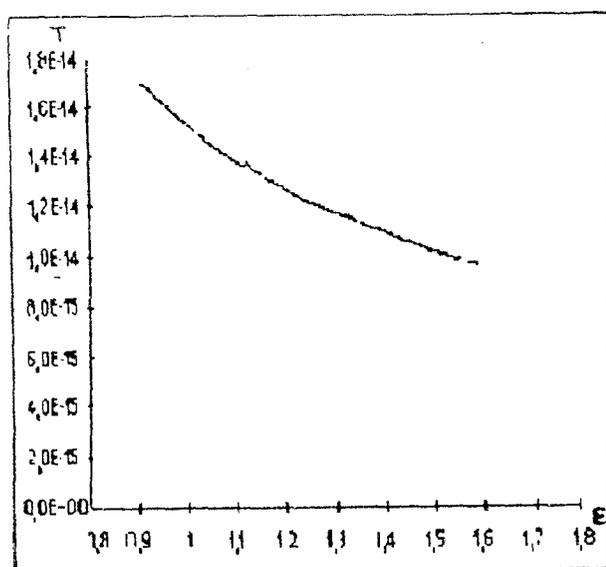
ocurre en realidad, aunque en la figura se vea algo diferente, lo que ocurre es que el movimiento inicialmente se realiza en las X e Y negativas, y allí las curvas están superpuestas, o con una diferencia bastante pequeña, en cambio, cuando el movimiento se traslada a las X e Y positivas, se ve en la gráfica que hay una mayor cantidad de curvas, y esto se debe a que las correspondientes trayectorias se alejaron un poco más respectivamente. Ahora la distancia que debería haber entre las curvas en ambos pozos de potencial debería ser la misma, pero debido a que estamos trabajando con un método que no es exacto, vemos que con el correr del tiempo, el error que produce el método utilizado va en aumento, es decir que tenemos un error acumulativo, que es el que produce que las trayectorias no coincidan como deberían hacerlo. También presentamos una gráfica de las velocidades involucradas, es decir V_x y V_y en función del tiempo, donde se puede apreciar el cambio que se produce al pasar el electrón

de un pozo al otro, Figura 3. Tenemos al electrón con una velocidad decreciente positiva, que de pronto se invierte y pasa a ser creciente positiva, según lo que muestra la gráfica, lo que en realidad ocurre, es que ambas velocidades se aproximan mucho a cero, debido a que están llegando al borde de la hoya de potencial, en ese momento se produce el salto de una hoya a la otra y el electrón comienza a acelerarse nuevamente, con la misma dirección que traía al principio, pero ahora ya en la otra hoya de potencial, de ahí lo que se ve en la gráfica. Finalmente tenemos una gráfica de los impulsos (a menos de una constante), donde podemos ver como van variando con el tiempo y como cuando uno es máximo, el otro es mínimo, que es lo que habíamos supuesto que ocurriría, Figura 4. Para encontrar la excentricidad que produce el período más próximo al valor determinado experimentalmente, hemos ido probando y he aquí una tabla, que muestra algunos de los intentos realizados. También tenemos una gráfica (Figura 5), que da la respuesta del período en función de la excentricidad, vemos como al

aumentar la excentricidad, el período disminuye y viceversa. De la tabla también vemos que hay una

E %	T	w1	w2
0,9	1,702175863452960E-14	4,13403880E+16	4,17107920E+16
0,95	1,611007316745560E-14	4,13403880E+16	4,17312740E+16
0,97	1,55549685934040E-14	4,13403890E+16	4,17394630E+16
0,98	1,550291443335770E-14	4,13403880E+16	4,17435580E+16
0,99	1,535094924736090E-14	4,13403880E+16	4,17476520E+16
1	1,519889387137840E-14	4,13403880E+16	4,17517450E+16
1,02	1,489262336975450E-14	4,13403880E+16	4,17599310E+16
1,027	1,489422907950090E-14	4,13403880E+16	4,17627980E+16
1,0285	1,489422907950090E-14	4,13403880E+16	4,17634090E+16
1,0295	1,489422907950090E-14	4,13403880E+16	4,17638190E+16
1,0298	1,489422907950090E-14	4,13403880E+16	4,17639420E+16
1,0299	1,489422907950090E-14	4,13403880E+16	4,17639820E+16
1,03	1,474314938336430E-14	4,13403880E+16	4,17640230E+16
1,11	1,367483279753790E-14	4,13403880E+16	4,17967480E+16
1,12	1,367847467753730E-14	4,13403880E+16	4,18008360E+16
1,14	1,337443826759200E-14	4,13403880E+16	4,18090120E+16
1,18	1,291853524767410E-14	4,13403880E+16	4,18253600E+16
1,2	1,261561938772860E-14	4,13403880E+16	4,18335310E+16
1,25	1,215714772781120E-14	4,13403880E+16	4,18539530E+16
1,4	1,094260049802980E-14	4,13403880E+16	4,19151570E+16
1,48	1,033511400813920E-14	4,13403880E+16	4,19477640E+16
1,6	9,657473098261250E-15	4,13403880E+16	4,19966250E+16
10	3,191202099425450E-15	4,13403880E+16	4,52861260E+16

determinada cantidad de datos que a pesar de tener distintas excentricidades, producen un período exactamente igual, esto estaría estableciendo el límite de respuesta del método, dado que la variación en la excentricidad no produjo ningún cambio. Aquí tenemos que decir, que la menor cantidad en la cual podemos hacer variar al período es el tiempo que tarda el electrón en realizar una órbita, dado que siempre tiene que haber un número entero de éstas en el momento de producirse el salto. Este tiempo es de : $0.015144085 \times 10^{-14}$ s, con el cual podemos determinar la cantidad de órbitas que realiza el electrón en cada pozo antes de pasar a la otra. De la gráfica vemos que, para obtener un período próximo al que estamos buscando, tenemos que considerar una excentricidad del orden del 1%. Según los datos, si usamos una excentricidad del 1.03%, obtenemos un período de oscilación $T = 1.474314938336432 \times 10^{-14}$ s, y si usamos 1.02% de excentricidad, tenemos un período de $T = 1.489262336975457 \times 10^{-14}$ s. Recordemos que el período determinado experimentalmente era $T = 1.4824561 \times 10^{-14}$ s, con lo cual tenemos que de los obtenidos estos dos son los más próximos y están uno por arriba y el otro por abajo del valor a aproximar. Dado que no podemos obtener un resultado más próximo, dada la limitaciones del método, tendremos que aceptar estos valores como los



más próximos. De todas formas los resultados obtenidos nos dan un error del $\frac{\Delta T}{T} \times 100 = 0.55\%$, el cual es bastante aceptable. Hay que destacar también, que estos períodos tienen dependencia de la energía inicial del electrón, pudiendo mejorarse la aproximación si se juega un poco con ella.

V. CONCLUSIONES

Hemos visto que es posible darle una explicación completamente causal a la oscilación del electrón en la molécula de Hidrógeno ionizada, y además pudimos con el mismo método obtener una aproximación bastante buena de su período de oscilación. Por supuesto, que para ello debimos renunciar a la simplicidad de

trabajar en modelos con fuerzas centrales y nos vimos en la necesidad de recurrir a métodos numéricos para poder llegar a un resultado, que en una primera aproximación es bastante bueno, aún a pesar del error que el mismo método de cálculo genera. Hay que decir, que aunque no explicamos el origen de la excentricidad del potencial, hay muchos posibles causas, las cuales deberán ser analizadas cuidadosamente para ver si alguna de ellas, o varias de ellas en conjunto, producen la excentricidad adecuada. Estas posibles causas pueden ser: las oscilaciones de los núcleos que en el modelo clásico se consideran fijos, algún posible acoplamiento magnético debida al movimiento de las partículas, retardos en el potencial, variaciones relativistas de la masa, etc. Todas estas son posibles causas que no han sido debidamente analizadas y que podrían explicar perfectamente el origen de la excentricidad. Hay que destacar también, que no hemos necesitado recurrir al formalismo de la Mecánica Cuántica para dar explicación a un fenómeno que hasta ahora solo era explicado en función de la probabilidad cuántica y solamente hemos utilizando las herramientas brindadas por la Mecánica Clásica. No aparecen nuevas entidades físicas, para obtener una explicación aceptable, lo cual nos debería hacer pensar sobre la posibilidad de encontrar respuestas a muchos otros problemas, (que hasta aquí solo se resuelven a través de métodos no tradicionales), mediante la introducción de condiciones iniciales adecuadas y no restrictivas, o por lo menos no tan restrictivas, como las que estamos acostumbrados a manejar.

REFERENCIAS

- 1 - LECTURE ON PHISICS. Tomo I - Feynman-Leigthon-Sands. Edit.: Addison-Wesley, reading Massachusetts.
- 2 - QUANTUM MECHANICS. - Cohen-Tannoudji. Edit.: John Wiley & Sons.
- 3 - SOPORTE PROYECTIVO DE LAS LEYES BASICAS DE LA FISICA. - Ovejero. Edit.: U.N.Sa.
- 4 - MECANICA.-Ovejero. Edit.: Depto. de Física de U.N.Sa.

CEILAP
 CITEFA - CONICET
 ZUFRIATEGUI Y VARELA
 1603 VILLA MARTELLI
 REPUBLICA ARGENTINA