

PRIMEROS DESARROLLOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

“Todas las leyes y hechos fundamentales más importantes de la ciencia física ya han sido descubiertos, y están ahora tan firmemente establecidos, que la probabilidad de que sean suplantados, como consecuencia de nuevos descubrimientos, es muy remota. Nuestros futuros descubrimientos deben buscarse en la sexta cifra decimal.”
Albert Michelson (1899) - Físico norteamericano

Una de las mayores conmociones intelectuales del siglo XX tuvo lugar con la constatación gradual de que la física del siglo XIX era ineficaz en los dominios del átomo. La teoría cuántica representa una nueva concepción del universo, de la cual la teoría clásica es una aproximación satisfactoria en el macromundo.

El desarrollo de las nuevas ideas puede seguirse a través del estudio de:

- la radiación del cuerpo negro;
- el efecto fotoeléctrico;
- los rayos X;
- el efecto Compton;
- las características corpusculares de las “ondas” de luz;
- la teoría de Bohr;
- el carácter ondulatorio de las “partículas” de materia;
- el principio de complementariedad;
- la naturaleza estadística de la mecánica ondulatoria;
- el principio de incertidumbre.

LA RADIACIÓN DEL CUERPO NEGRO

Cuando se calienta un cuerpo, éste irradia energía electromagnética, y si la temperatura es suficientemente alta, parte de la energía toma la forma de luz visible.

Los objetos negros absorben la mayor cantidad de radiación y por consiguiente son calentados por ella hasta la mayor temperatura, en comparación con los demás cuerpos. Y viceversa: cuando los cuerpos negros, después de calentados hasta temperaturas elevadas, se convierten en fuentes de luz, a una temperatura de calentamiento dada irradian con mayor intensidad que los demás cuerpos.

Los experimentos mostraban que un cuerpo negro calentado y mantenido a una temperatura dada, produce una gama completa de radiaciones electromagnéticas, desde las ondas de λ largas de radio e infrarrojas (IR) hasta las ondas de λ cortas del ultravioleta (UV), pasando por todos los colores de la luz. A una temperatura dada, la energía radiante presenta un máximo en un particular rango de λ , independientemente de la naturaleza química del emisor. Cuanto más alta es la temperatura del cuerpo, mayor es la energía asociada con cada región de λ (ley de Stefan-Boltzmann) y más se desplaza el máximo hacia las λ cortas (en el espectro visible, hacia el azul) (ley de Wien). El conjunto de resultados experimentales puede resumirse en una familia de curvas que expresan la distribución de energía frente a λ .

A principios de 1900, Rayleigh y Jeans presentaron un cálculo clásico de la densidad de energía de la radiación del cuerpo negro. En la deducción se consideraba que los electrones de las paredes metálicas se agitan térmicamente y emiten radiación electromagnética dentro de la cavidad. En tales condiciones la radiación consta de ondas estacionarias con nodos en las paredes. La energía promedio por onda se determinó a partir de la ley clásica de la equipartición de la energía. La ley así obtenida mostraba acuerdo con los datos experimentales en la zona de λ largas del espectro visible. Pero predecía que cuanto más corta fuera λ , tanto mayor debería ser la intensidad de la radiación térmica. Esto no se observaba en la práctica. Para peor, la intensidad de la radiación, al pasar a ondas cada vez más cortas, debería crecer sin límites (“catástrofe ultravioleta”).

No era posible explicar la forma de la curva característica de emisión a partir del modelo de emisión clásico. Entender lo que pasa, explicar la forma de las curvas en función de procesos más fundamentales que tienen lugar en el interior del cuerpo caliente, era un desafío que no admitía el análisis tradicional. Esto ocurría cuando la física se sentía muy segura de sí misma con la mecánica newtoniana y el electromagnetismo

maxwelliano. Parecía capaz de todo, excepto quizás de resolver esta “pequeña dificultad”.

En 1900 Planck, un teórico alemán, abordó el problema al revés, con lucidez práctica. Confeccionó una expresión matemática que reproducía todos los miembros de la familia de curvas de datos experimentales. En esta ecuación se incluían dos constantes cuyo valor alteró por ensayo y error hasta que la expresión se ajustó satisfactoriamente a las curvas de datos. Aunque era un simple artilugio que no proporcionaba una explicación de lo que estaba pasando, una de las constantes acabaría relacionada con una nueva cantidad fundamental (la “constante de Planck”); la otra constante terminó relacionada con la “constante de Boltzmann”.

La fórmula empírica de Planck fue un éxito sorprendente. La misma noche en que fue anunciada en una reunión científica, uno de sus colegas extendió las medidas más allá del intervalo y la exactitud obtenidas previamente, y confirmó el acuerdo completo entre los hechos precisos y la fórmula. Alentado por este éxito, Planck reanudó su trabajo para obtener un esquema conceptual cuya consecuencia necesaria fuera su fórmula.

Planck supuso que la radiación es emitida por los osciladores eléctricos submicroscópicos que pueblan las paredes del emisor. En la imagen clásica, estos osciladores radían su energía continuamente, mientras su movimiento se apacigua gradualmente. Planck siguió el método estadístico de Boltzmann y aplicó su formalismo, pero comprendió que la única manera de llegar a su ecuación era:

- suponiendo que la energía promedio de las ondas estacionarias depende de la frecuencia del oscilador;
- atomizando la energía;
- suponiendo que la probabilidad de que el emisor contenga más osciladores elementales a bajas energías es mayor que a altas energías;
- asumiendo, en consecuencia, que la emisión energética sólo puede producirse durante un cambio súbito de la amplitud de oscilación.

A la porción de energía Planck dio el nombre de cuanto, palabra que en latín significa cantidad (“quantum”). Más tarde, explicó que la reunión de la energía en determinados cuantos era “una hipótesis puramente formal”, a la que no le prestó realmente mucha atención. Debe observarse que Planck aceptaba la teoría ondulatoria de Maxwell como una descripción correcta del modo en que la radiación se propaga por el espacio (difundiéndose de modo continuo y en todas direcciones desde el foco emisor), pero al mismo tiempo consideraba, en oposición a la teoría de Maxwell, que los osciladores no radían continuamente, sino sólo cuando sus amplitudes sufren un descenso brusco.

La mayoría de los físicos, incluido Planck, estaban totalmente convencidos de que los procesos de la naturaleza son continuos (como Newton había expresado, *natura non saltus facit*). La hipótesis cuántica fue considerada como algo demasiado radical y poco convincente para casi todos los físicos de aquel tiempo. El cuanto languideció, suspendido entre la duda y el olvido, durante casi cinco años. Fue entonces cuando Einstein extendió y aplicó la concepción de Planck a un viejo enigma: el efecto fotoeléctrico.

EL EFECTO FOTOELÉCTRICO

En general se reconoce que el primer paso que condujo al descubrimiento del efecto fotoeléctrico y al reconocimiento de que la teoría clásica de la luz necesitaba una revisión fundamental, fue una observación incidental recogida por Hertz 18 años antes, durante la investigación experimental que proporcionó la prueba más convincente en favor de la teoría electromagnética clásica de Maxwell.

Hertz había construido un aparato en el que las chispas saltaban la separación de un circuito de transmisión y generaban ondas invisibles de radio. Estas ondas, que cruzaban el laboratorio, revelaban su presencia haciendo saltar chispas en un circuito receptor situado a cierta distancia. Un día notó que las chispas del receptor inducidas por las ondas de radio eran más frecuentes cuando el botón de bronce pulido que formaba uno de los terminales del disparador de chispas era iluminado simultáneamente por un haz rico en ultravioleta. La radiación ultravioleta que bañaba el bronce incrementaba el flujo eléctrico.

Hertz no prestó mucha más atención a esto, pero otros sí lo hicieron, mejorando la técnica experimental. A finales del siglo XIX ya se tenía claro que la energía radiante, al incidir sobre diversos metales, podía arrancar electrones de sus superficies (efecto fotoeléctrico). La existencia del efecto no era sorprendente: la onda luminosa transporta energía, y parte de la energía absorbida por el metal puede concentrarse de algún modo sobre un electrón determinado y transformarse en energía cinética. Sin embargo, muchos de los aspectos del fenómeno desafiaban toda interpretación teórica en el marco de la teoría electromagnética de la luz.

Por ejemplo, se podría esperar que cuanto mayor fuera la intensidad de la luz incidente, más violenta sería la extracción de electrones del metal, y mayor sería la velocidad con que éstos saldrían. Sin embargo, no era esto lo que ocurría: la velocidad de los electrones expulsados no dependía de la intensidad sino de la frecuencia de la luz. Al aumentar la intensidad de la luz aumentaba el número de electrones liberados, pero sus velocidades no se afectaban en absoluto. Y para frecuencias menores que un valor de umbral, no había efecto fotoeléctrico, independientemente de lo intensa que fuera la iluminación.

También cabía esperar un tiempo de retardo entre el choque de la luz sobre la superficie y la expulsión del electrón, dado que la energía de la luz se concebía distribuida uniformemente en el frente de onda. Sin embargo, no se medía ningún tiempo de retardo detectable.

En 1905, Einstein puso en duda la teoría clásica de la luz y propuso una nueva teoría, citando el efecto fotoeléctrico como aplicación que podía mostrar cuál era la teoría correcta. Planck había restringido su concepto de la cuantización de la energía al mecanismo de emisión o absorción de un oscilador; creyó que la energía de la luz, una vez emitida, estaba distribuida en el espacio como una onda. Einstein propuso en cambio que era la energía radiante en sí la que existía en paquetes concentrados, más tarde denominados fotones (término acuñado por Lewis en 1926). La energía radiante está cuantizada; se absorbe y emite en forma discontinua porque ella misma es discontinua. Cada onda electromagnética de frecuencia ν tiene localizada su energía en gran número de fotones individuales, cada uno de los cuales tiene una energía $h\nu$.

En los tiempos en que Einstein propuso su ecuación fotoeléctrica, se contaba con datos incompletos, pues las medidas precisas y reproducibles del efecto fotoeléctrico eran de la mayor dificultad. Por ello, su ecuación era todavía esencialmente una predicción; durante muchos años se obtuvieron resultados conflictivos y en general los físicos tenían una actitud negativa hacia la hipótesis cuántica einsteiniana.

Adoptando la idea de que la energía de la radiación está cuantizada, Einstein contribuyó también directamente a la aceptación de la teoría de Planck, todavía entonces sin una base firme. Pero Planck expresó dudas acerca de las ideas de Einstein. Si se aceptaba la teoría del fotón, escribía Planck en 1910, "la teoría de la luz sufriría un retraso de siglos", a los tiempos en que los seguidores de Newton y Huygens luchaban entre sí por la aceptación de la teoría corpuscular u ondulatoria de la luz. Toda la obra de Maxwell quedaría invalidada si se aceptaba la cuantización de la energía radiante, "sólo por algunas especulaciones, más bien dudosas".

En 1914 - 1915 Millikan determinó en forma concluyente que la ecuación fotoeléctrica de Einstein estaba en completo acuerdo con los datos experimentales. Millikan había estado 10 años intentando demostrar, mediante una labor meticulosa, que Einstein estaba completamente equivocado y al final, había establecido la "validez exacta" de la teoría.

LOS RAYOS X

El efecto fotoeléctrico proporciona una convincente experiencia de que los fotones luminosos pueden transportar energía a los electrones. El fenómeno inverso (vale decir, la transformación total o parcial de la energía cinética de un electrón en movimiento, en un fotón) fue descubierto (aunque no comprendido) antes de que salieran a la luz los trabajos teóricos de Planck y Einstein.

En 1895 Roentgen observó que una radiación altamente penetrante de naturaleza desconocida se producía cuando electrones rápidos incidían sobre la materia. Estos "rayos X" tenían la propiedad de propagarse en línea recta aún cuando atravesaran un campo eléctrico o magnético, de pasar a través de materias opacas, de hacer relucir a sustancias fosforescentes y de impresionar una placa fotográfica. Cuanto más rápido era el electrón inicial, más penetrantes eran los rayos X que resultaban, y cuanto mayor era el número de electrones, mayor era la intensidad del haz de rayos X.

Se sospechó que los rayos X eran ondas electromagnéticas, pues la teoría electromagnética afirma que una carga eléctrica acelerada emitirá ondas electromagnéticas y un electrón que se mueve rápidamente y es frenado, sufre una aceleración. La naturaleza ondulatoria de los rayos X fue establecida en primer lugar en 1906, cuando se puso de manifiesto su polarización. En 1912 se propuso medir su longitud de onda empleando cristales para difractarlos; en los años que siguieron se realizaron los experimentos, que proporcionaron para λ un valor 10^{-4} veces la longitud de onda de la luz visible y un contenido energético 10^4 veces mayor.

Pero el acuerdo entre la teoría clásica y los datos experimentales no era satisfactorio en aspectos importantes. Por ejemplo: El espectro arranca desde un valor mínimo de λ , que depende del potencial acelerador de los electrones. Esto se comprende teniendo en cuenta la teoría cuántica de la radiación: λ_{\min}

puede interpretarse como el correspondiente a una energía máxima del fotón, en un proceso inverso al fotoeléctrico (la energía cinética de un electrón incidente es primero absorbida por los osciladores atómicos y luego emitida de nuevo cuando el oscilador vuelve a su nivel energético primitivo).

A veces se considera al proceso de radiación por frenado como la inversa del proceso Compton. En el primero un electrón pierde parte de su energía (cinética) para generar un fotón; en el segundo, un fotón pierde parte de su energía para dársela a un electrón. Sin embargo, existe una analogía más poderosa del proceso de radiación por frenado con el efecto fotoeléctrico.

EL EFECTO COMPTON

Los experimentos de Compton confirmaron en 1923 la naturaleza granular de la radiación.

Compton hizo que un haz de rayos X de λ bien definida incidiera sobre un blanco de grafito. Para varios ángulos de dispersión, midió la intensidad de los rayos X dispersos como una función de su longitud de onda. Observó que, aunque el haz incidente constaba esencialmente de una sola λ , los rayos X dispersos tenían su máxima intensidad para dos valores de λ : uno de ellos coincidía con λ incidente; el otro era mayor por una cantidad que variaba con el ángulo al que se observan los rayos X dispersos.

La presencia de la nueva λ no se puede entender con la teoría electromagnética clásica, que predice que la onda dispersada debe tener la misma frecuencia y la misma longitud de onda que la onda incidente.

Compton interpretó sus resultados experimentales postulando que el haz de rayos X incidente no era una onda de frecuencia ν , sino un conjunto de fotones, cada uno de energía $h\nu$, que chocaban con electrones libres en el bloque de dispersión como si se tratara de una colisión entre bolas de billar. Los fotones “rechazados” que emergen del blanco forman la radiación dispersa. Como el fotón incidente transfiere parte de su energía al electrón con el cual choca, el fotón dispersado debe tener una energía más baja, y por lo tanto una frecuencia más baja, que implica una longitud de onda mayor. A diferencia de su comportamiento en el proceso fotoeléctrico, los fotones de rayos X son dispersados en vez de absorbidos.

La presencia del máximo para el cual la longitud de onda del fotón no cambia en la dispersión se explica suponiendo que resulta de las colisiones con electrones ligados fuertemente a un átomo, o de fotones incidentes con energía pequeña. En estos casos, $h\nu$ es demasiado pequeño como para que se pueda medir.

h Y LA FÍSICA CUÁNTICA

En la discusión de la radiación del cuerpo negro y en la del efecto fotoeléctrico, la constante h de Planck es una medida de la granularidad de la energía. La física clásica corresponde a $h = 0$, ya que en este caso todo el espectro de energía sería continuo.

En los rayos X y en el efecto Compton la constante h tiene nuevamente importancia fundamental. Si h fuera igual a cero no habría λ_{\min} en los rayos X ni habría $\lambda\lambda$ en los experimentos de Compton, y la teoría clásica sería válida.

La cantidad h es la constante central de la física cuántica. Lo que al principio no era más que una mera invención matemática para el análisis del problema del cuerpo negro, es una constante fundamental ligada a la naturaleza corpuscular de la energía radiante.

El hecho de que h no sea cero significa que la física clásica no es válida en general. Pero el hecho de que h sea muy pequeña ($h = 6,6 \cdot 10^{-34}$ joule.seg) hace que con frecuencia resulte difícil detectar los efectos cuánticos.

La naturaleza cuántica de la radiación se manifiesta a λ cortas y en el dominio atómico y subatómico. Las predicciones clásicas de la radiación del cuerpo negro concordaron con los experimentos para λ largas, pero difirieron radicalmente para λ cortas; el efecto Compton se descubrió en la región de los rayos X, digamos, $\lambda = 1$ Amstrong; cuando $\lambda \rightarrow \infty$ los resultados cuánticos se funden con los clásicos. En la fórmula de Compton, cuando el dispersor es un electrón libre m_0 es significativo, pero si la masa que interviene es la de un átomo (por no hablar de materia en gran cantidad), m_0 se hace virtualmente indetectable; cuando $m \rightarrow \infty$ el resultado cuántico de dispersión se funde con el resultado clásico.

LAS CARACTERÍSTICAS CORPUSCULARES DE LAS “ONDAS” DE LUZ

Varios siglos de trabajo habían establecido con absoluta seguridad que la luz se propaga de un sitio a otro

como si fuera una onda. Sin embargo, ahora parecía igualmente claro que la luz interacciona con la materia en los procesos de absorción y emisión como si fuera un haz de partículas.

En verdad, la idea de los fotones presentaba muchas dificultades. Representaban “paquetes de energía” sin masa en reposo; en esto diferían de los corpúsculos de luz newtonianos, con los cuales tenían una débil semejanza, a pesar de que es costumbre referirse a la teoría de los fotones de Einstein como la teoría corpuscular o teoría de partículas luminosas. Nuestras mentes tienden a mantener aquellas ideas que pueden visualizarse claramente y es necesario un considerable autocontrol para imaginar un cuanto de energía radiante, sin pensar en algo material que le sirva de soporte. En cambio, era más fácil de imaginar con Maxwell, que la energía radiante se extendía uniformemente sobre un frente de ondas.

Había otras cuestiones aún más difíciles. ¿Cuál es el volumen y el área de la sección transversal de la “zona” sobre el frente de ondas donde el fotón está localizado? ¿Cuál sería el significado de la “longitud de onda” y “frecuencia” de la luz que determina el contenido energético del fotón según la ecuación $E = h\nu$, si el fotón, por decirlo así, es sólo una “zona” del frente de onda y no parte de todo el tren de ondas? ¿Qué ocurriría con los fenómenos de interferencia y polarización que sólo pueden explicarse con una teoría ondulatoria?

De hecho, la situación paradójica se manifiesta en forma muy evidente en el mismo experimento de Compton, donde se utiliza un espectrómetro para medir las λ de los rayos X (siendo interpretada la medición mediante una teoría ondulatoria de difracción), y la dispersión afecta a λ en una forma que puede entenderse únicamente si se trata a los rayos X como partículas. Es en las mismas expresiones $E = h\nu$ y $p = h/\lambda$ donde se combinan las características ondulatorias (λ y ν) y las de partícula (E y p).

Durante un tiempo, estas dificultades conceptuales forzaron a los físicos a mantener las dos teorías por separado, aplicando la teoría ondulatoria o la teoría del fotón según se requiriera por la índole del problema. La solución, establecida relativamente hace poco en la electrodinámica cuántica, lleva consigo la combinación de ambas teorías y considera que los fotones se distribuyen sobre el frente de ondas de un modo estadístico y no hay que pensar que se encuentren localizados en puntos determinados.

Es importante comprender que la mayoría de las dificultades provienen de querer aplicar a fenómenos submicroscópicos, conceptos obtenidos de la experiencia con cuerpos a gran escala que obedecen las leyes de Newton. A pesar de lo incómodo que parezca la dualidad onda – fotón o de la gran disparidad entre concepto e intuición, la teoría del fotón permanece firme con su potencia probada para explicar, predecir y estimular nuevos descubrimientos.

EL MODELO ATÓMICO DE BOHR

Einstein fue el primero en apartarse de todos los intentos ad hoc para retocar las antiguas y fracasadas teorías e insistió en la necesidad de nuevas leyes físicas. Su trabajo fue seguido por Bohr, Rutherford y muchos otros que desarrollaron teorías detalladas de la estructura atómica. De las formulaciones matemáticas de Schrödinger y Heisenberg surgió un nuevo modelo de átomo, menos visualizable en términos mecánicos que los modelos clásicos, pero mucho más efectivos.

Se sabía desde hace tiempo que los gases emiten luz cuando son excitados de alguno de estos modos: calentando el gas a alta temperatura (como cuando una sustancia es volátil y se coloca en una llama), por una descarga eléctrica (cuando el gas se encuentra entre los electrodos de un arco eléctrico) y por una corriente eléctrica continua (establecida a través de un tubo delgado lleno del gas).

Cuando la luz así emitida se resolvía en sus componentes por un espectroscopio de prisma, era notablemente distinta del espectro continuo de emisión de los sólidos y líquidos incandescentes. Los gases tienen espectros de emisión de líneas, que sólo presentan luz en algunas λ bien definidas, con espacios oscuros entre ellas. El espectro aparece como una serie de líneas irregularmente espaciadas, unas muy brillantes y otras menos.

El segundo punto de diferencia respecto al espectro de emisión continua es que el espectro de emisión de líneas es marcadamente diferente para elementos de radiación distintos. Cada sustancia tiene su propio diagrama característico de longitudes de onda. Algunos materiales revelan un espectro de emisión más complejo, otros son mucho más simples (el vapor de hierro muestra unas seis mil líneas brillantes, mientras que el sodio tiene sólo dos líneas en el espectro visible).

La gran variedad de líneas y el espaciado de la líneas parecía completamente inexplicable y permaneció siendo un enigma durante casi tres generaciones. Pero de cualquier modo, cada material podía identificarse a partir de su espectro de emisión. Y cada vez se utilizaban espectroscopios de prisma y de red más

poderosos para clasificar la longitud de onda de los diagramas.

En 1814 Fraunhofer encontró que cuando la luz solar pasaba a través de una estrecha rendija y su espectro visible se examinaba con sistemas de buenos prismas, la continuidad de los colores aparecía rota por una serie de rayas oscuras, irregularmente espaciadas, pero muy netas. Encontró análogas líneas negras en los espectros de algunas estrellas brillantes. En 1859 Kirchoff mostró que cada vapor tiene un diagrama característico de líneas de absorción, que se corresponden con algunas líneas del catálogo de los diagramas de emisión para la sustancia gaseosa en particular. Esto llevó a considerar las líneas de Fraunhofer como muestra evidente de la presencia de elementos específicos en la atmósfera de una estrella.

Si la teoría clásica no podía suministrar explicación a la distribución de intensidades en el caso relativamente simple y uniforme de espectros de emisión continua, la explicación de los espectros de emisión de líneas brillantes parecía infinitamente más difícil. Se podía argüir que los átomos de diferentes elementos pueden tener estructuras características propias, de modo que cada átomo individual emitiría a la frecuencia de su vibración oscilatoria particular. Sin embargo, los espectros de sólidos y líquidos no muestran diferencias de un elemento a otro y esto sólo puede significar que la proximidad e incesante colisión mutua entre átomos enmascara la vibración individual característica. Pero incluso en los gases enrarecidos de un tubo de descarga, los átomos están chocando continuamente miles de millones de veces por segundo de acuerdo con el modelo de la teoría cinética de gases, y sin embargo, dan lugar a espectros de líneas bien definidas.

Además, aunque cada línea de absorción se correspondía con alguna línea de emisión del mismo gas, sin embargo existían siempre muchas líneas en el espectro de emisión sin equivalencias en los espectros de absorción. Este punto estaba en conflicto con la idea de radiación de resonancia, pues el resonador absorbería toda radiación para que esté "sintonizado", la cual sería capaz de emitir al excitarlo.

La avalancha de datos relativos a longitudes de onda e intensidades de las líneas parecía sumir a los teóricos en un caos.

En 1885 Balmer, siguiendo un método empírico, encontró una fórmula que relacionaba entre sí las longitudes de onda de las cuatro líneas principales en la zona visible del espectro de emisión del hidrógeno. No había insinuado ninguna explicación física para su fórmula empírica, pero estaba seguro que podría utilizarse para calcular otros valores de n distintas de las cuatro ya conocidas, simplemente dando distintos valores sucesivos a los dos números enteros que aparecían en la expresión generalizada de su fórmula original.

En efecto, al aumentarse la precisión de los aparatos y técnicas experimentales, pudieron explorarse nuevas regiones del espectro y a la serie de Balmer se fueron añadiendo gradualmente otras, todas para el hidrógeno, cuyo nombre es el de su descubridor (serie Paschen en 1908, serie Lyman en 1914, serie Brackett en 1922, serie Pfund en 1924).

Aunque la fórmula de Balmer no sirviese directamente para la descripción de los espectros de otros gases distintos del hidrógeno, inspiró fórmulas análogas a las de aquel y fueron de gran utilidad para vislumbrar algún orden en otros espectros de gran complejidad. Cada vez se hacía más evidente que debía existir un mismo mecanismo físico básico detrás de la gran variedad de observaciones espectroscópicas. Pero faltaban las piezas claves para la construcción del esquema conceptual necesario, el cual surgiría primero en una dirección completamente distinta.

En 1912 Bohr había comenzado a desarrollar las nociones preliminares de una teoría que habría de conducir, finalmente, al progreso de la revolución cuántica. En esa época se había llegado al convencimiento de la validez del modelo de átomo de Rutherford, en el que casi toda la masa existe en un núcleo central, pero la configuración de los electrones alrededor del núcleo era todavía un enigma. Existían sólo sugerencias generales de que los electrones se movían alrededor del núcleo en órbitas cerradas, según un esquema algo parecido al sistema planetario.

Sin embargo, esta idea tenía dos puntos fácilmente vulnerables. En primer lugar, aunque suministraba electrones para explicar la presencia de los fenómenos de las corrientes eléctricas, la ionización, la fotoelectricidad, la neutralidad del átomo ordinario, la difusión de rayos X, etc., no explicaba cuantitativamente los detalles de cualquiera de estos procesos ni explicaba cualitativamente los espectros de líneas. En segundo lugar, si bien la hipótesis de que los electrones giraban alrededor del núcleo era necesaria para explicar por qué los electrones no seguían la fuerza de la atracción eléctrica cayendo sobre el núcleo, se creaba de inmediato un problema aparentemente insuperable. De acuerdo con la teoría electromagnética ortodoxa, una partícula cargada que sufre una aceleración debe emitir energía electromagnética; por tanto, el electrón giratorio se movería en espiral cada vez más cerca del núcleo, radiando sin interrupción.

La obra creativa de Bohr consistió en ensamblar la idea del átomo nuclear con el esquema conceptual de Planck y Einstein para la teoría cuántica de la luz.

El primer postulado de Bohr indica que el electrón no irradia energía mientras se encuentra en una órbita determinada. A cada estado en el diagrama de niveles energéticos del oscilador le corresponde una órbita estable definida. Para irradiar un fotón o absorber energía, el electrón debe verificar el tránsito de una órbita estable (o sea, sin radiación) a otra. Además, Bohr postuló que cada emisor atómico del hidrógeno tiene idénticamente el mismo esquema de niveles energéticos y que los niveles energéticos no están igualmente espaciados.

El segundo postulado de Bohr establece que la mecánica y la electricidad ordinarias pueden utilizarse para discutir el movimiento del electrón en una órbita estable y sin radiación, pero el paso entre estados estables no puede tratarse sobre esta base.

El tercer postulado de Bohr afirma que durante la transición entre niveles energéticos, el electrón emite un fotón cuya frecuencia ν viene dada por la fórmula de Planck-Einstein ($\nu = \Delta E/h$), independientemente de la frecuencia de la revolución orbital del electrón. Reconoció que este postulado está en claro contraste con las ideas ordinarias de la electrodinámica, pero afirmó que resultaba necesario para explicar los hechos experimentales.

Estos tres postulados explican la emisión de los espectros de líneas de un átomo de hidrógeno, pero el esquema dejaba sin explicar el origen del diagrama de niveles energéticos. Bohr sospechaba que existía, probablemente, alguna relación definida entre la frecuencia de la luz emitida y las dos frecuencias distintas de las órbitas inicial y final, y que esta relación llevaba consigo las energías de estas dos órbitas. Pudo finalmente encontrar esa relación, suponiendo que si el electrón "cae desde el infinito" a un estado determinado de energía E , la frecuencia de la luz emitida es el valor medio de la frecuencia inicial (cero) y final (de la revolución orbital). La energía de los electrones en la n -ésima órbita permitida (contada desde la órbita más próxima al núcleo, $n = 1$) viene entonces dada por $\frac{1}{2} nh\nu$.

Finalmente, Bohr pudo deducir una expresión idéntica a la fórmula empírica de los espectros de hidrógeno, en la que aparecía un valor predicho teóricamente para la constante empírica de Rydberg, en función de la carga y la masa de un electrón, la velocidad de la luz y la constante de Planck. También pudo explicar los espectros de absorción.

Si bien la teoría de Bohr se aplicó con éxito en muchas formas a los átomos de un solo electrón, ni siquiera pudo competir con las observaciones experimentales del átomo neutral de helio, para no hablar de átomos más complicados. Además, aún en el caso de átomos de un solo electrón, la teoría no tenía ninguna prescripción para el cálculo de las intensidades de las líneas espectrales observadas, ni describe cómo el electrón pasa de una órbita a otra.

Las teorías de Bohr y de Planck parecían, sin embargo, remiendos en que algunas ideas clásicas que fallaron fueron declaradas no válidas y reemplazadas por ciertos casos especiales. Lo que se necesitaba era una reformulación y generalización de las leyes de la física, que dieran resultados correctos para todos los sistemas (macroscópicos y microscópicos) que se redujera a las leyes clásicas al tratarse de lo macroscópico.

Tal reformulación se hizo a fines de los años 20; entonces nació la teoría moderna de la mecánica cuántica, que incorporó las grandes ideas de la teoría cuántica primitiva (que dio cierta intuición y base conceptual para la teoría que surgió). Pero aún faltaba otro paso, que dio de Broglie.

EL CARÁCTER ONDULATORIO DE LAS "PARTÍCULAS" DE MATERIA

En 1924 de Broglie propuso, en tu tesis doctoral, la existencia de ondas de materia. Pero por su aparente falta de evidencia experimental no se consideró que sus ideas tuvieran realidad física alguna. Fue Einstein quien reconoció su importancia y validez y las llevó a la atención de los físicos.

La hipótesis de de Broglie era que la dualidad aparente en el comportamiento de la radiación, como ondas y como partículas, se aplicaba igualmente a la materia. Así como un cuanto de radiación lleva asociada una onda que gobierna su movimiento, de la misma manera una cantidad de materia tendrá una onda material correspondiente que gobierna su movimiento. De hecho, de Broglie propuso que los aspectos ondulatorios de la materia estaban relacionados cuantitativamente con los aspectos de partícula, exactamente en la misma forma como se encontró para la radiación.

Esto es, para la materia, lo mismo que para la radiación, la energía total E de la entidad está relacionada con la frecuencia ν de la onda asociada con su movimiento, por la ecuación $E = h\nu$. Y la cantidad de movimiento p de la entidad está relacionada con la longitud de onda λ de la onda asociada, por la ecuación $p = h/\lambda$.

Einstein había demostrado ya que materia y energía eran aspectos diferentes de la misma cosa. En la concepción de de Broglie, la radiación corresponde a partículas de masa en reposo cero (moviéndose a la velocidad c) y la materia corresponde a partículas de masa en reposo finita (moviéndose a velocidades menores a c), pero las mismas propiedades generales de transformación se aplican a ambas entidades.

Elsasser demostró en 1926 que la naturaleza ondulatoria de la materia podría comprobarse de la misma manera que se había comprobado la naturaleza ondulatoria de los rayos X, a saber, haciendo que un haz de electrones de energía apropiada pegara en un sólido cristalino. Los átomos del cristal sirven como red tridimensional de centros de difracción para la "onda" electrónica. Se deben buscar máximos de difracción bien definidos en ciertas direcciones características, igual que para la difracción de rayos X.

Todos los resultados experimentales estuvieron completamente de acuerdo, cualitativa y cuantitativamente, en la predicción de de Broglie y proporcionaron pruebas convincentes de que la materia se mueve de acuerdo con las leyes del movimiento ondulatorio.

La teoría de de Broglie presentaba además un vínculo interesante con el modelo de átomo de Bohr. Todas las órbitas permitidas correspondían a situaciones en que la longitud de la circunferencia es igual a un número entero de longitudes de onda electrónica.

No sólo los electrones, sino todos los objetos materiales, cargados o no cargados, muestran características ondulatorias en su movimiento, bajo las condiciones de óptica física. Se han llevado a cabo experimentos que así lo muestran, con haces moleculares de hidrógeno, haces atómicos de helio y neutrones. La existencia de ondas de materia está bien establecida.

La materia (macroscópica) ordinaria tiene longitudes de onda muy cortas, porque su cantidad de movimiento es elevada. Sus características ondulatorias son por tanto prácticamente indetectables y dominan las características corpusculares. De la misma manera, hubo que ir a λ muy cortas para encontrar evidencia experimental de la naturaleza de partícula de la radiación (región de rayos X y rayos gamma).

Una vez más se advierte el papel central jugado por la constante de Planck. Si $h = 0$, entonces $\lambda = h/mv = 0$. La materia siempre tendría una longitud de onda más pequeña que cualquier dimensión característica y nunca podría observarse la difracción; esta es la situación clásica. Es la pequeñez de h la que oscurece la existencia experimental de las ondas de materia en el mundo macroscópico. Pero en el mundo microscópico las λ de de Broglie son comparables a las dimensiones características de los sistemas que se estudian y se pueden observar experimentalmente las propiedades ondulatorias de la materia en movimiento.

EL PRINCIPIO DE COMPLEMENTARIEDAD

Bohr resumió la situación en su principio de complementariedad. Los modelos de onda y de partícula son complementarios: si mediante una medición se comprueba el carácter ondulatorio de la radiación o de la materia, entonces es imposible comprobar el carácter de partícula mediante la misma medición, y viceversa. El modelo que utilizemos lo determina la naturaleza de la medición. Cada descripción ofrece una visión parcial de la verdad total respecto al sistema.

El principio de complementariedad es un componente principal de lo que se llama "la interpretación de Copenhague" de la mecánica cuántica. Esta interpretación supone que el mundo físico posee justamente aquellas propiedades que se revelan por la experiencia, incluyendo los aspectos corpuscular y ondulatorio, y que la teoría sólo puede tratar con los resultados de las observaciones y no con una realidad hipotética subyacente que surja o no bajo las apariencias. Cualquier intento de ir más lejos para especificar con mayor precisión los detalles microscópicos de la estructura y evolución de un sistema atómico, inevitablemente sólo encontrará aleatoriedad e indeterminación.

Esta interpretación encontró, y todavía sigue encontrando, fuertes objeciones de una minoría de insignes físicos (entre ellos, de Broglie y Einstein). En ellos persiste una profunda resistencia a abandonar la concepción tradicional de la realidad física, expresada en la famosa crítica de Einstein sobre la aleatoriedad inherente: "Dios no juega a los dados".

Por lo tanto, la radiación y la materia no son ni simplemente ondas ni simplemente partículas. Se necesita un modelo más general para describir su comportamiento. El eslabón entre el modelo de onda y el de partícula

se obtiene mediante una interpretación probabilística de la dualidad de onda y partícula. En el caso de la radiación, fue Einstein quien unificó las teorías ondulatoria y corpuscular; subsecuentemente, Born aplicó un argumento similar para unificar las teorías ondulatoria y corpuscular de la materia.

En el modelo de onda, la intensidad de la radiación es proporcional a \bar{E}^2 (valor promedio, en un ciclo, del cuadrado de la intensidad del campo eléctrico de la onda). En el modelo del fotón la intensidad es $Nh\nu$, donde N es el número promedio de fotones por unidad de tiempo que atraviesan la unidad de área perpendicular a la dirección de propagación. Einstein sugirió que \bar{E}^2 , que en la teoría electromagnética es proporcional a la energía radiante en la unidad de volumen, se podría interpretar como una medida del número promedio de fotones por unidad de volumen (se usa la palabra "promedio" porque los procesos de emisión son de naturaleza estadística). Einstein interpreta a \bar{E}^2 como medida probabilística de la densidad de fotones, es decir, como la probabilidad de encontrar un fotón en cierto intervalo de espacio en un instante dado.

Born propuso una unificación similar de la unidad de onda y partícula para la materia. Pero esto vino después de una teoría ondulatoria para partículas materiales, llamada mecánica ondulatoria, que fue desarrollada por Schrödinger.

LA NATURALEZA ESTADÍSTICA DE LA MECÁNICA ONDULATORIA

En 1924, de Broglie había sugerido que podría construirse una teoría de propiedades atómicas por analogía con la teoría de vibraciones de los sistemas mecánicos.

En 1925 Schrödinger siguió esta pista y en 1926 publicó por vez primera su teoría, conocida como "mecánica de ondas" o "mecánica ondulatoria". Se trataba de una teoría matemática de las propiedades atómicas, en la cual la cuantización de los niveles energéticos estaba basada en los valores permitidos ("autovalores") de las longitudes de onda del electrón.

Pronto se reconoció que se trataba de una generalización satisfactoria de la teoría de Bohr. Schrödinger generalizaba las especulaciones limitadas de de Broglie en una formulación matemática global. Proporcionaba una ecuación fundamental (la "ecuación de Schrödinger") que gobernaba el comportamiento de los electrones en cualquier átomo o molécula y resumía los criterios en que se debían seguir los aspectos ondulatorios del micromundo. Existía ya un precedente en la forma de la ecuación diferencial de la onda clásica que establece los requisitos matemáticos para todo tipo de ondas macroscópicas. Y existía también un trabajo de Hamilton, que en el siglo XIX había hecho una síntesis matemática de la mecánica newtoniana y de la teoría de los rayos de luz, que había quedado relegada por falta de acicate experimental.

Guiado por las ideas de Hamilton y de de Broglie, Schrödinger ideó su propia ecuación diferencial, que es una ecuación de movimiento para las ondas de de Broglie. Es un enunciado matemático planteado en términos de espacio, tiempo, masa, energía y constante de Planck. La solución de la ecuación es una función designada por ψ (psi), a la que se llama función de onda. Se utiliza la palabra "función" porque, lo mismo que los campos eléctrico y magnético, ψ es una función matemática del espacio y del tiempo. Sin embargo, al contrario que los campos eléctrico y magnético, los valores de ψ pueden ser números complejos y por tanto, se desafiaba una interpretación física simple.

En los casos simples, en los que la ecuación de Schrödinger puede resolverse exactamente (o casi exactamente), se predicen los valores correctos de las frecuencias espectrales y las intensidades de las líneas espectrales, así como otras propiedades observables del sistema. Para la mayor parte de los átomos y moléculas la ecuación no se ha resuelto exactamente a causa extrema complejidad que supone la existencia de muchos electrones.

Aunque ψ parece jugar un importante papel en la mecánica ondulatoria de Schrödinger, de acuerdo con algunos físicos es sólo un elemento auxiliar superfluo. Este punto de vista deriva de la existencia de otra teoría, publicada unos meses antes que la de Schrödinger. Se trata de la teoría de Heisenberg, ahora conocida como "mecánica de matrices".

Heisenberg desarrolló una serie alternativa de reglas para calcular las frecuencias e intensidades de las líneas espectrales utilizando sólo relaciones entre magnitudes observables (en particular, datos experimentales de los espectros) y eliminando todas las ficciones no observables, las imágenes y modelos de órbitas y saltos electrónicos. Con la colaboración de Born y Jordan, Heisenberg convirtió su método en una teoría matemática completa de los procesos atómicos, capaz de rendir los mismos resultados que la teoría de Schrödinger.

Se ha dicho, con razón, que es difícil encontrar en la historia de la física dos teorías destinadas a tratar el

mismo tipo de experiencia que difieran radicalmente más que estas dos: la mecánica ondulatoria de Schrödinger y la mecánica de matrices de Heisenberg. La primera destaca la continuidad de los procesos físicos y la conducta ondulatoria del electrón (casi visualizable, a pesar del oscuro significado de ψ). La segunda parte de la discontinuidad de los procesos físicos, sugerida por la discretización observada en las líneas espectrales, y considera al electrón como una partícula (aunque sin asignarle un espacio definido). Sin embargo, rápidamente (en 1926) Schrödinger y Eckart, trabajando independientemente uno del otro, mostraron que la dos teorías son matemáticamente equivalentes.

El desarrollo de la física desde esa época no ha disminuido en modo alguno la validez de las teorías de Heisenberg- Schrödinger, consideradas ahora como dos formulaciones alternativas de la mecánica cuántica.

En 1926, no mucho después de la publicación de los artículos de Schrödinger, Born intentó una interpretación de los conceptos de la mecánica cuántica en función de categorías clásicas aplicables a las partículas y propuso lo que se ha convertido en la "interpretación ortodoxa" de ψ . Para ello sugirió una unificación de la dualidad de onda y partícula para la materia, análogamente a lo que había hecho Einstein para la radiación.

Para partículas que se mueven en la dirección x con cantidad de movimiento lineal constante, la función de onda de Schrödinger puede describirse mediante simples funciones senoidales. Esas funciones son análogas en su forma a la ecuación para el campo eléctrico de una onda electromagnética senoidal con longitud de onda λ y frecuencia ν , moviéndose en la dirección x . Born conjeturó que el promedio de ψ^2 jugaría, para las ondas de materia, un papel análogo al jugado por ψ^2 para las ondas de radiación. Así, el promedio de ψ^2 , es una medida del número promedio de partículas por unidad de volumen, o dicho de otro modo, es proporcional a la probabilidad de encontrar a una partícula en la unidad de volumen en lugar y tiempo dados. En síntesis, Born sugirió que el electrón es realmente una partícula y que la función de onda ψ asociada, es una función de probabilidad (una onda de información que dice, no dónde está el electrón, sino dónde es más probable que esté).

Y así como la suma de las funciones de onda ψ para dos ondas electromagnéticas superpuestas se emplea para entender la producción de fenómenos de interferencia y difracción entre ondas de radiación, también la suma de las funciones de onda ψ para dos ondas de materia superpuestas podrá emplearse para entender la producción de fenómenos de interferencia y difracción entre ondas de materia.

Desde el punto de vista de Born, las posiciones y las velocidades de cada partícula subatómica son básicamente aleatorias. No puede decirse que tengan valores definidos, sino sólo que poseen ciertas probabilidades de exhibir valores particulares. Born decía que la hipótesis contraria (defendida al principio por Schrödinger), según la cual el electrón es una onda dispersa en el espacio con una densidad de carga dada por la función de onda ψ , es inadmisibles. Pues si el electrón no está ligado a un átomo, su función de onda se dispersará en un espacio infinito; sin embargo, el experimento indica que el electrón está, realmente, presente en algún lugar particular. Este resultado es consistente con la idea de que el electrón posee cierta probabilidad de encontrarse en cualquier lugar determinado; al realizar el experimento para determinar su posición, se convierte esta probabilidad en una certidumbre (está o no está allí, pero no puede estar parcialmente). Cualquier intento de analizar una propiedad definida del electrón lleva consigo un acto de medida.

Cabría preguntarse si es necesaria una interpretación probabilística. De hecho, la interpretación probabilística de la mecánica cuántica no es la única posible, y (aunque no todos están de acuerdo con el cambio drástico que supone una teoría que trata de probabilidades en vez de certezas e insiste en que la naturaleza no proporciona más que eso) es la que más amplia aceptación tiene en la actualidad

Heisenberg y Bohr demostraron por primera vez en 1927 cuán esencial es el concepto de probabilidad para la unión de las descripciones ondulatoria y corpuscular de la materia y la radiación.

EL PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

La interpretación probabilística de Born sugiere que sólo se puede calcular la probabilidad de los sucesos. Pero si se supiera con precisión dónde está un electrón en el comienzo, con qué rapidez y en qué dirección va, ¿por qué no se lo podría seguir exactamente? Quizás Heisenberg, para enunciar su conocido principio, pensó esa no era la pregunta correcta y que sería más razonable preguntarse si en realidad es posible medir la posición y la velocidad con exactitud.

En 1927 Heisenberg propuso otra forma de caracterizar las consecuencias de la mecánica cuántica, mediante el principio de incertidumbre. Este postulado afirma que existen ciertos pares de propiedades físicas de una partícula que no pueden medirse simultáneamente hasta un grado de exactitud

arbitrariamente elevado. Cuanto más exactamente se trata de medir una propiedad en este par, menos exacta será la medida en la otra:

$$(\Delta x) \cdot (\Delta p) \geq h / 2\pi$$

$$(\Delta E) \cdot (\Delta t) \geq h / 2\pi$$

(x: posición; p: cantidad de movimiento lineal; E: energía; t: intervalo de tiempo durante el cual posee esa energía). Aunque el principio se aplica a cualquier objeto, constituye una limitación significativa sólo para partículas atómicas o subatómicas debido a la pequeñez de h.

El principio de incertidumbre puede deducirse de la mecánica ondulatoria, pero su validez puede también establecerse considerando diversos posibles experimentos diseñados para la medida de x y p, o de E y t. Tales experimentos fueron analizados en detalle en una famosa discusión entre Bohr y Einstein. La conclusión fue que toda medida lleva consigo una interacción entre el observador (o su aparato) y el objeto que se observa. El fotón que relaciona a ambos, elimina la distinción radical entre sujeto y objeto.

El principio de incertidumbre puede ayudar a entender por qué es posible, tanto para la radiación como para la materia, tener naturaleza doble de onda y partícula. Born estableció la relación en la siguiente forma: "Tan sólo la posibilidad limitada de las mediciones define los límites entre nuestros conceptos de partícula y onda. La descripción de partícula significa en el fondo que llevamos a cabo las mediciones con el objeto de obtener información exacta acerca de las relaciones de cantidad de movimiento y de energía (por ejemplo, en el efecto Compton), mientras que los experimentos que equivalen a la determinación de lugar y tiempo podemos siempre imaginármolos en función de la representación ondulatoria (por ejemplo, el paso de electrones a través de láminas delgadas de metal y las observaciones del haz desviado). Pero así como cada determinación de la posición lleva consigo una incertidumbre en la cantidad de movimiento, y cada determinación de tiempo una indeterminación en la energía, lo contrario es también verdad. Cuanto más precisa sea nuestra determinación de la cantidad de movimiento y la energía, más libertad damos a la posición de la partícula y al tiempo de un suceso".

Si tratamos de determinar experimentalmente si la radiación es onda o partícula, por ejemplo, encontramos que el experimento que fuerza la radiación a manifestar su carácter ondulatorio, suprime vigorosamente su carácter de partícula. Si modificamos el experimento para hacer aparecer el carácter de partícula, se suprime el carácter ondulatorio. Nunca podemos tener los dos conceptos, ondulatorio y de partícula, juntos en la misma situación experimental. Esto, desde luego, es la esencia del principio de Bohr de la complementariedad, en que las ideas de onda y de partícula se complementan en vez de contradecirse recíprocamente.

El principio de Heisenberg podría interpretarse como una restricción de nuestros conocimientos sobre el electrón teniendo en cuenta las limitaciones de los métodos experimentales existentes, sin rechazar la creencia de que el electrón, realmente, posee, por ejemplo, una posición y una cantidad de movimiento definidas. La expresión "principio de incertidumbre" se aplicaría entonces al conocimiento del observador y no a la propia naturaleza.

Otra manera de interpretar el principio, junto con la afirmación de Born de que las magnitudes atómicas son inherentemente aleatorias, conduce a negar la posibilidad de descubrir algo exactamente cierto en un sistema físico, pues el observador o el aparato de medida constituyen partes esenciales de todo sistema físico bajo estudio.

Más allá de estas discusiones, la mecánica cuántica permite hacer predicciones perfectamente definidas de las propiedades de los sistemas físicos y estas propiedades pueden medirse con los mismos resultados (incluyendo la incertidumbre de medida) por todos los observadores. Los científicos no necesitan abandonar la idea de la existencia de un mundo real exterior.

Aunque la mecánica cuántica ha estimulado y estimula muchas discusiones de índole filosófica, sería inexacto decir que la adopción de esta teoría en la física requiere la aceptación de una postura filosófica realista o una postura filosófica idealista.

Bibliografía:

- "Conceptos de relatividad y teoría cuántica" (R. Resnick, Ed. Limusa, México, 1986)
- "Introducción a los conceptos y teorías de las ciencias físicas" (G. Holton, S. Brush, Editorial Reverté, Barcelona, 1984)
- "Física en perspectiva" (E. Hecht, Addison-Wesley Iberoamericana, EEUU, 1987)