## **EFEMÉRIDES**

## En Física

## HACE 75 AÑOS:

## El nacimiento de la mecánica cuántica

Mil novecientos veintiséis es un año estelar en la configuración de las bases de la mecánica cuántica tal como la conocemos en la actualidad, independientemente de que algunas de éstas ya fueran establecidas durante 1925 y de que la exposición de la teoría en su versión final no se produjera hasta la famosa conferencia de Niels Bohr en Como (Italia), en septiembre de 1927. Los acontecimientos relevantes que conducen a esta calificación son la publicación simultánea de las tres descripciones matemáticas de los fenómenos cuánticos, a saber: la llamada aproximación matricial de Heisenberg, Born y Jordan; la denominada álgebra cuántica de Dirac; y, finalmente, la más conocida ecuación de Schrödinger. Podemos decir que con ello se cierra el gran período de excitación intelectual, aunque también de gran confusión, que se iniciara con la publicación en 1900 de la hipótesis de Planck. Veinticinco años de perplejidad frente a unos fenómenos asociados a lo muy pequeño que no acababan de encontrar cabida en el aparentemente sólido edificio conceptual de la física clásica, y que irán vertebrando un nuevo paradigma de cuya eclosión celebramos el setenta y cinco aniversario.

Las tres descripciones a las que hacemos referencia son enteramente equivalentes desde el punto de vista matemático —Dirac expresó sus dudas a este respecto, pero esto es puramente anecdótico— aunque cada una de ellas entronca en actitudes y sensibilidades distintas, muy dependientes de las circunstancias y formación de los respectivos proponentes. Éste es un extremo sobre el que existe una amplía documentación y que ilustra muy bien la inne-

gable impronta personal que los científicos dan a su forma de resolver los problemas. Ya volveremos sobre este punto más tarde. Antes, los hechos.

Sorprendentemente, la asociación cuanto de luz a una partícula no fue enteramente aceptada hasta veintitrés años después de que Planck formulara su hipótesis -; cuidado, Planck jamás pensó, al proponerlos, en los cuantos como partículas!- y este convencimiento no llegó hasta que numerosos experimentos, que culminan con los realizados por Compton, no pusieron de manifiesto la insoslayable realidad de la naturaleza corpuscular de la luz. El propio Einstein, sabedor de la trascendencia de la cuestión, se movía con mucha cautela. La oposición a resucitar la teoría corpuscular de la luz de Newton era tan fuerte que el congreso Solvay de 1911 afirmaba1: "Insisto en el carácter provisional de este concepto, que no parece reconciliable con las consecuencias de la teoría ondulatoria comprobada experimentalmente". Cierto, se aceptaba la naturaleza cuántica de la radiación, pero ello no implicaba automáticamente el salto conceptual hacia el corpúsculo de luz. Por ejemplo, Niels Bohr, portaestandarte del salto al vacío conceptual que supuso más tarde la interpretación de Copenhague de la mecánica cuántica, se resistió largo tiempo a asumir la idea.

Todo ello resulta muy curioso en físicos clásicos pues ciertas claves que permitieran aceptar mejor la idea de dualidad en la naturaleza de la luz ya se encontraban en la propia teoría clásica. El formalismo lagrangiano de la mecánica representaba uno de los pilares mejor establecidos de la física clásica y no había constituido ninguna dificultad acoger las ecuaciones de Maxwell del electromagnetismo dentro de éste.

Puede escribirse un "lagrangiano de Maxwell" en función del campo electromagnético, tratado como un sistema de un número infinito de grados de libertad, y que hace intervenir una "energía cinética" de propagación. Esta generalización es importantísima ya que permite hacer abstracción de un "medio" hipotético, seno de la propagación de ondas electromagnéticas o luminosas. Marca, en cierta forma, un eventual retorno al concepto de los fenómenos luminosos que prevalecía antes del descubrimiento de las ecuaciones de Maxwell y que era una concepción corpuscular. Podía, como consecuencia, intuirse lo siguiente: si podemos obviar la existencia de un portador de ondas, la conclusión es que lo que se propaga pueda ser material, eventualmente corpuscular. En otras palabras, aunque las ecuaciones de Maxwell son de naturaleza ondulatoria, su derivación a partir de un principio de mínima acción les confiere una posible interpretación corpuscular.

Formalmente, medio camino hacia la idea de un corpúsculo asociado al campo electromagnético estaba ya recorrido. Tanto más es así que mucho antes, hacia 1830, uno de los mayores contribuyentes a la construcción del formalismo de la mecánica clásica, Hamilton, había formulado una teoría matemática que aunaba óptica geométrica y mecánica. El argumento era bien simple: si asociamos a una onda de luz un rayo -una trayectoria- ¿por qué no asociar a una trayectoria de una partícula una onda? Por supuesto, dentro del esquema de Hamilton ésta no era una realidad física, pero ahí quedaba la semilla para quien quisiera aprovecharla.

Una vez más es Einstein el que recogió la antorcha y completó el camino del que hablábamos antes. No lo hizo inspirándose en la teoría de Hamilton sino acudiendo a su propia teoría de la relatividad restringida que, recordemos, resuelve las contradicciones surgidas en el

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Citado por John Gribbin en *En busca* del Gato de Schrödinger.

contexto de la covariancia de las ecuaciones de Maxwell -cosa nada sorprendente a la luz de lo que venimos relatando-. Fue en 1917 cuando por medio de distintos argumentos llegó a la conclusión de que partículas lumínicas (de masa nula) tienen un momento p = h v/c, con h, v, y c, la constante de Planck, la frecuencia de la onda y la velocidad de la luz, respectivamente. Esta tesis se vería confirmada en 1923 por los experimentos de Compton sobre el choque entre fotón -el nombre no sería dado hasta 1926- y electrón. Ya nadie, a partir de ese momento dudó de la ambigua dualidad de la naturaleza la luz. Sin embargo, había dos teorías confirmadas por los experimentos y ninguna relación lógica entre ellas, como se lamentaba Einstein en 1924.

El camino recorrido desde la hipótesis de Planck había sido largo (23 años), pero lo más difícil ya estaba hecho. A partir de ese momento los acontecimientos se precipitaron y en menos de tres años ya estaría totalmente configurada la base de la teoría. Un primer camino, aunque no el único, lo inauguró Louis-Victor de Broglie en su tesis doctoral, presentada en la Sorbona de París en 1924. El argumento de De Broglie es bien conocido y responde a la pregunta de por qué no generalizar la dualidad a otras partículas<sup>2</sup>. Trabajemos un poco la relación de Einstein para entender cómo hacerlo. En aquella, recordemos, p = hv/c, luego  $\lambda$ , longitud de onda, es igual a h/p ¿Qué pasaría si, al igual que en el caso del fotón, imaginamos que toda partícula con momento p tiene una onda piloto -así la veía- de longitud de onda igual a h/p?, pensó de Broglie. En tal caso, contestaba, quedaría mejor entendida la naturaleza discreta de los niveles atómicos del modelo de Bohr. Éstos vendrían dados por órbitas electrónicas tales que la onda asociada pudiese ser como los modos de una cuerda vibrante, a saber, un conjunto de múltiplos enteros de una cierta frecuencia fundamental. De Broglie extrajo las conclusiones de su argumentación y, a la pregunta por parte del tribunal de tesis sobre una posible verificación experimental de su teoría, respondió sugiriendo la difracción de electrones sobre un cristal; el espaciado interatómico actuaría de rendija apropiada para electrones suficientemente energéticos -muy pequeña longitud de onda-. Los experimentos de Davisson y Germer y de G. P. Thomson en 1927 ratificarían por completo la intuición de De Broglie, pero no hubo que esperar a éstos para que los teóricos la adoptaran, dándole el contenido y alcance que perdura hasta nuestros días.

La relación efecto-causa entre la hipótesis de De Broglie y el trabajo de Schrödinger de 1926 es directa e inequívoca. Paul Langevin, supervisor de la tesis del primero, había mandado información sobre los resultados de ésta a Einstein, quien enseguida se encargaría de darles publicidad. Max Born, a la sazón director del grupo de Göttingen, y que ocupará un lugar de honor en toda esta historia -como veremos más tarde- habla de cómo conociendo muy bien la monografía de De Broglie a través de Einstein, recibió en 1925 una carta de Davisson:

...con resultados sorprendentes sobre la reflexión de electrones sobre superficies metálicas. Mi colega de Física Experimental, James Franck, y yo sospechamos inmediatamente que las curvas de Davisson eran espectros de redes cristalinas de las ondas electrónicas del tipo de De Broglie...Pero los razonamientos de De Broglie no nos abrían el camino de la aplicación a las estructuras electrónicas de los átomos. Esto estaba reservado a Schrödinger³.

Un trabajo de Einstein puso a Schrödinger sobre la pista de su famosa ecuación. Amplió la ecuación de ondas de De Broglie, desde el caso de la partícula libre, al caso dependiente de un potencial, formulando a la vez los requisitos que debía cumplir la solución. El éxito fue inmediato. Simultáneamente, Dirac e, independientemente, Heisenberg, Born y Jordan dieron a conocer sus versiones más algebraicas de la mecánica cuántica, pero sus trabajos no tuvieron en aquel momento el impacto del resultado de Schrödinger. El hecho de acudir a una representación en términos de ondas y de ecuaciones en derivadas parciales hacía de la aproximación de Schrödinger algo mucho más fácil de asimilar por parte de los físicos con formación clásica que las otras presentaciones, más abstractas y que representaban una mayor ruptura respecto de la mecánica clásica.

Un año antes, a comienzos de 1925, Heisenberg iniciaba una aproximación al problema totalmente distinta a la anterior, presentada en un artículo en Zeitschrift für Physik, la prestigiosa revista alemana que tanto marcó la física del primer tercio de siglo. Cuenta Max Born en sus memorias cómo, en una carta dirigida a Arnold Sommerfeld en enero de 1923, solicitaba que, como tutor de aquel, le permitiese venir a Göttingen con él, ya que, según le explicaba,

...nos hallamos enfrascados en un interesante trabajo, del que le hablaré más adelante.

Más adelante, en la misma carta, aclaraba:

En este momento considero totalmente factible deducir matemáticamente, partiendo de principios, las estructuras atómicas de Bohr. Por desgracia, no poseo las dotes de usted para leer tales relaciones de los datos empíricos espectrales, sino que he de ir abriéndome lentamente el camino hacia la aclaración y explicación de los principios.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> La argumentación que expondré no sigue al pie de la letra la original de De Broglie, pero respeta la esencia de su idea.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Max y Hedwig Born, *Ciencia y Conciencia de la Era Atómica*, Alianza Editorial, Madrid, 1971, p. 106.

La insatisfacción que refleja M. Born en su carta es el producto de las limitaciones de las reglas de trabajo en la misma época, consistentes bien en abordar un problema atómico con métodos clásicos, para después aplicar un procedimiento de cuantización –cuantización semiclásica—, bien en "adivinar" relaciones que se reducen a las clásicas para altos números cuánticos, de acuerdo con el Principio de Correspondencia de Bohr.

Heisenberg, ya en Göttingen, puso fin a este período avanzando la idea, aparentemente trivial pero, en fondo y forma, revolucionaria, de que conceptos e ideas que no corresponden a hechos físicamente observables, no deben ser utilizados en descripciones teóricas4. Conceptos como el de órbita electrónica, radio de ésta, o, en general, el de posición de una partícula cuántica, dejan de tener sentido. Se debe hablar, por ejemplo, de amplitudes de transición entre estados. Heisenberg se dedicó a investigar las reglas operativas que regían un esquema en el que las amplitudes de transición fuesen la base de la descripción, aplicándolas con éxito a ejemplos sencillos. Cuenta la historia que, sufriendo un fuerte ataque de fiebre del heno, se retiró a la isla de Helgoland, para ahí, sin otra cosa que hacer, completar su trabajo. De vuelta a Göttingen entregó un manuscrito a Born para que éste lo publicase, "caso de encontrarle alguna utilidad", en palabras del receptor. "Inmediatamente comprendí la importancia de la idea", cuenta Born, aunque matizaba "la regla de multiplicación de Heisenberg no me dejaba tranquilo". Recordó entonces el cálculo matricial de sus tiempos de estudiante y constató cómo se ajustaba a las manipulaciones de Heisenberg, llegando a la "extraña" fórmula

$$pq - qp = i\hbar$$

Momento y posición no se representan por valores numéricos sino por símbolos que no conmutan. Born intuyó el alcance de esta "nueva mecánica" y, junto a Heisenberg y Pascual Jordan, publicaban en 1926 el famoso *Drei-Männer-Arbeit*<sup>5</sup>, con el cual ponían fin a la parte formal de su teoría.

La contribución de Max Born a la naciente mecánica cuántica no acaba aquí. Estamos siempre en 1926, poco después de la publicación de los artículos de Schrödinger. Ya hemos mencionado el éxito de éste al recurrir a la idea de una función de ondas w, fácilmente representable en el espacio para, al menos, el caso de una partícula. Schrödinger estaba convencido de que esto conciliaba los fenómenos cuánticos con la física clásica y sugirió interpretar los electrones, no como partículas, sino como una distribución continua de densidades  $|\psi|^2$ . Esto no satisfizo al grupo de Göttingen ya que ahí estaban las partículas, según decía Born, bien registrables mediante un contador Geiger o de trayectoria visible en una cámara de niebla. La interpretación de |ψ|<sup>2</sup> debía de ir por otros derroteros. Una vez más, es una idea de Einstein la que marcó el camino, según asegura Born. En el caso de la luz, Einstein había asociado el cuadrado de la amplitud de onda como probabilidad de existencia de fotones. Born, haciendo analogía, propuso que  $|\psi|^2$  representara una densidad de probabilidad de partículas. A lo largo de 1926 desarrolló esta idea en una serie de tres publicaciones, quedando totalmente validada con la explicación de las leyes de choque obtenidas experimentalmente en procesos de colisiones atómicas.

Después de entregar su primer manuscrito a Born, Heisenberg viajó en el verano de 1925 a Cambridge, donde dio una conferencia. En su exposición no habló del tra-

bajo en cuestión, pero sí mencionó éste a Ralph Fowler, bajo cuya supervisión estaba haciendo la tesis doctoral P.A.M. Dirac. Por lo tanto, aparte Pauli y el grupo de Göttingen, Dirac conoció de primera mano las ideas de Heisenberg, incluso antes de su publicación. Ya hemos mencionado que Heisenberg no hablaba todavía en su artículo de 1925 de no-conmutatividad, pero a Dirac no se le escapó la implicación ya que conocía bien el cálculo matricial. Su argumento recurría a lo que él denominó la analogía clásica, según la cual la mecánica clásica da una descripción correcta cuando las partículas son lo suficientemente grandes para no verse alteradas por la observación. En consecuencia, conceptos importantes en mecánica clásica han de corresponder a conceptos importantes en mecánica cuántica. En particular está el concepto de conmutación de variables definido dentro del contexto de los corchetes de Poisson, llegando Dirac a la definición cuántica del corchete [u,v] de dos variables y cualesquiera:

$$uv - vu = i\hbar [u, v]$$

La gran analogía entre esta definición del corchete y la correspondiente versión clásica llevó a Dirac a formular la hipótesis de que los corchetes más sencillos de una y otra tiene el mismo valor. Por lo tanto, los corchetes cuánticos entre variable canónicas habían de ser:

$$q_i q_j - q_j q_i = 0$$

$$p_i p_j - p_j p_i = 0$$

$$q_i p_j - p_j q_i = i\hbar \delta_{ij}$$

En palabras de Dirac,

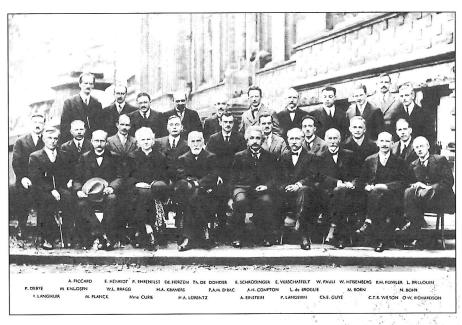
estas relaciones de conmutación son la solución al problema de hallar las condiciones cuánticas para todos los sistemas que tengan una imagen clásica y que se puedan describir mediante variables canónicas...

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Einstein aplicó el mismo principio cuando desterró los conceptos de velocidad absoluta y simultaneidad en su Teoría de la Relatividad.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Literalmente, el trabajo de los tres hombres, publicado en *Zeitschrift für Physik* 35 (1926), p. 527.

pudiéndose elaborar todo una estructura formal para la mecánica cuántica basándose en la formulación lagrangiana y hamiltoniana de la mecánica clásica. Esta visión la completó en parte Dirac en cuatro artículos publicados en 1926 y que constituyeron la base de su tesis doctoral.

La formulación de Dirac es, sin duda, la más elegante desde un punto de vista matemático. Es más, el éxito de Dirac en utilizar para construirla la estructura formal de la formulación hamiltoniana de la mecánica clásica, la hace todavía más atractiva, proporcionando un sentido de continuidad con la mecánica clásica que me atrevo a calificar de tranquilizador. Si ésta es la impresión que recogemos con el paso de los años, no está de más decir que, al igual que la visión de Heisenberg, fue, sin embargo, considerada en su momento más "revolucionaria" que la propuesta de Schrödinger. Dirac y Heisenberg, nacidos en 1902 y 1901, respectivamente, tenían la "insolencia" necesaria que da la juventud para asumir la responsabilidad de cortar el nudo gordiano, fuera de las ataduras conceptuales clásicas en las que se hallaba inmerso un miembro de la antigua generación como Schrödinger -nacido en 1887 y profesor en Zürich, bastión de la respetabilidad por excelencia. Al igual que Einstein, de formación clásica como él, Schrödinger nunca aceptó la interpretación de Copenhague de la mecánica cuántica. Luchó toda su vida contra el principio de indeterminación, pensando que acabaría triunfando el buen viejo principio de causalidad. De hecho, decía que el enfoque algebraico de Göttingen le "aterraba", si no le "repelía" -Heisenberg le devolvió la moneda calificando su visión de "repugnante"-. Pero muy pronto resultó evidente que ambos enfoques constituían dos formas diferentes del mismo principio, y quién daría la estructura formal apropiada para demostrarlo, sería un actor del que no hemos hablado hasta ahora, pero que no casualmente se hallaba en Göttingen en ese mágico año de 1926: John von Neumann.



Reunión Solvay de 1927.

El complejo formalismo de Dirac recogía aceptablemente bien una formulación general de la mecánica cuántica, pero en aquel momento su autor no supo o no quiso probar rigurosamente ciertos pasos de sus deducciones. Sólo von Neumann desarrolló una formulación completa totalmente rigurosa en una serie de tres artículos publicados en 1926, aunque no la concluiría hasta 1929. Su introducción al tema data de una conferencia que dio Heisenberg en el seminario de matemáticas de Göttingen, a solicitud de D. Hilbert, el famoso matemático. Von Neumann, húngaro de nacimiento, era estudiante ahí, y rápidamente se puso a trabajar con Hilbert y su ayudante, Lothar Nordheim, en la mejora de la formulación matemática de la teoría de Heisenberg, con el objetivo de ponerla en forma axiomática, no sin dejar de tener en cuenta que Born y Norbert Wiener -gran matemático, quien pasó el período 1925-27 en Göttingen- ya habían esbozado algunos aspectos de ésta. Von Neumann había here-

dado el entusiasmo de Hilbert por el método axiomático6, y en ese momento estaba convencido de poder abstraer la esencia de la teoría cuántica utilizando el álgebra de un espacio de infinitas dimensiones como vehículo para fundar la teoría sobre axiomas estrictos según el espíritu de la filosofía de Hilbert. Su teoría formal se apoya en la noción de vector en un espacio abstracto, que denominó de Hilbert, y ciertas clases de operadores que actúan sobre dichos vectores. Fijó cinco axiomas, probando que los estados de Heisenberg y Schrödinger los satisfacían, consiguiendo seguidamente la unificación formal de estas dos representaciones. Hoy día todavía se considera la obra de von Neumann como la que pone al descubierto la estructura matemática esencial de la mecánica cuántica.

> **Víctor Fairén Le Lay** Dpto. de Física Matemática y de Fluidos

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Recordemos la famosa conferencia de 1900 en la que Hilbert expuso sus diez propuestas sobre los problemas más destacados de las matemáticas; en particular, la sexta fue el tratamiento de la física de la misma forma que él había hecho en su axiomatización de la geometría. El paso de los años ha enfriado notablemente la fe en el método axiomático que quiso imprimir Hilbert al ejercicio de las matemáticas (véase el libro de R. Penrose, *La Nueva Mente del Emperador*, Ed. Crítica, Barcelona, 1997).