

Historia de la Física

Historía de la mecánica cuántica: del cuerpo negro a las mecánicas matricial y ondulatoria

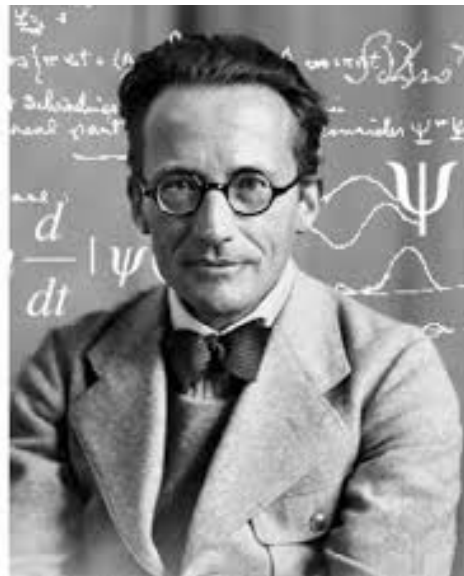
José Adrián Castelo Martínez

Universidad de Murcia

Junio de 2017

Profesor:

Antonio Guirao Piñera



Índice

1	Introducción	4
2	Orígenes de la Teoría Cuántica	5
2.1	Radiación de cuerpo negro	5
2.2	Espectro atómico	8
3	Dualidad onda-corpúsculo. Louis de Broglie	13
4	Mecánica Matricial. Werner Heisenberg	15
5	Mecánica ondulatoria. Erwing Schrödinger	20
6	Conclusiones	22
	Referencias	23

RESUMEN

En este trabajo se realiza un acercamiento histórico al desarrollo de la mecánica cuántica, desde la vieja teoría cuántica de la radiación de cuerpo negro y la espectroscopía que desembocó en los modelos de Bohr y Sommerfeld hasta las mecánicas ondulatorias y matricial de Schrödinger y Heisenberg respectivamente.

Su enfoque ha sido técnico pensando en un estudiante de la carrera de física y su motivación; precisamente, la de suplir las carencias que la enseñanza actual de esta materia ofrece, centrándose directamente en la formulación última de la mecánica cuántica dada por Dirac e impidiendo que el alumno vea el devenir de ideas que desembocaron en ella.

1 Introducción

En este trabajo presentamos la historia de la física cuántica deteniéndonos en sus hechos más importantes: sus orígenes con la radiación de cuerpo negro y la explicación de los espectros atómicos y del efecto fotoeléctrico (sección 2); pasando tras ello a la dualidad onda corpúsculo de De Broglie (sección 3); la mecánica matricial (sección 4) y finalmente a la ondulatoria (5).

Hemos tratado este recorrido de manera cronológica pues las ideas se correlacionan, se influyen unas a otras, y como no; esta influencia está supeditada a la ley de causalidad por lo que tal ordenación se muestra como lógica.

En los cursos de mecánica cuántica a los que nos habitúan nuestras universidades rara vez tiene cabida una introducción histórica a los hechos, lo cual ha sido la principal motivación para elegir este tema de trabajo. La segunda motivación era acudir a los desarrollos explícitos de los físicos de renombre dentro de la mecánica cuántica, pues difieren mucho de lo que en las clases se enseña.

Dentro de la primera motivación, es de agradecer que aun se encuentren libros que sí hagan tal introducción histórica. De ellos (referencias [1], [2]) se han sacado las líneas principales de este trabajo, así como de la referencia [3].

Para extraer citas relevantes o reproducir algún cálculo explícito, se ha acudido cuando se ha podido a los artículos originales. Se ha seguido la regla de añadir a pie de página las referencias originales a todos ellos, aunque en el caso del autor del trabajo la mayoría han sido consultados en la referencia [4], que se muestra como un gran (si no el mejor) compendio de los mejores y más importantes artículos de la mecánica cuántica. Otros libros usados que resumen la historia de la mecánica cuántica han sido las referencias [5], [6] y [7].

Dado que el objetivo era suplir la carencia de ese acercamiento a los hechos históricos que desembocaron en la mecánica cuántica, y a sus primeros desarrollos, hemos creído conveniente cortar nuestro trabajo tras la mecánica ondulatoria de Schrödinger pues; como de hecho se mencionará en el trabajo, el desarrollo posterior de Dirac aunando ambas formulaciones es ya la manera en que actualmente se enseña la mecánica cuántica en las universidades. Motivos análogos se han considerado para no incluir la interpretación probabilística de la mecánica cuántica, pues además de encontrar demasiadas versiones en la literatura, la más aceptada/utilizada se desarrolló rápidamente y no ha sufrido cambios en su enseñanza, por lo que su interés histórico es menor.

2 Orígenes de la Teoría Cuántica

La mejor manera de motivar los principios de la mecánica cuántica sea tal vez echar una rápida mirada a sus inicios, preocupándonos primero por los problemas que los físicos confrontaron en los primeros años del siglo pasado. Problemas que finalmente desembocarían en el desarrollo de la moderna mecánica cuántica.

2.1 Radiación de cuerpo negro

A finales del siglo XIX el problema de explicar el espectro de radiación de cuerpo negro (radiación en equilibrio térmico con la materia una temperatura dada T) *traía a los físicos de cabeza*. La energía a temperatura T por unidad de volumen entre las frecuencias ν y $\nu + d\nu$ había sido medida en la Universidad de Berlín, y según la tan bien establecida termodinámica debía ser una función universal de la frecuencia y la temperatura únicamente, pero su obtención rigurosa se tornaba imposible.

Un cálculo simple fue aportado por John William Strutt (1842-1919); más conocido como Lord Rayleigh, en el año 1900 ¹ que detallaremos a continuación. Se sabía que podían entender la radiación como una suma de Fourier sobre modos normales e imaginando un cubo de lado L cuyas caras opuestas satisfagan idénticas condiciones de contorno (lo común es imponer paredes perfectamente reflectantes) tal que la fase del campo de radiación cambie un múltiplo de veces 2π entre caras se tiene que el campo es una suma de términos proporcionales a $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}$, con $\mathbf{q} = 2\pi\mathbf{n}L^{-1}$ y $\mathbf{n} \in \mathbb{N}^3$ ².

La longitud de onda de un modo normal es $\lambda = 2\pi|\mathbf{q}|^{-1}$ y por tanto la frecuencia será:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{|\mathbf{n}|c}{L} \quad (2.1)$$

Cada modo normal ocupa una celdilla de volumen la unidad en el espacio de vectores \mathbf{n} , luego el número de modos normales $N(\nu)d\nu$ en el intervalo $[\nu, \nu + d\nu]$ es un diferencial de volumen en ese espacio (una corteza esférica de grosor $d|\mathbf{n}|$):

$$N(\nu)d\nu = 2 \times 4\pi|\mathbf{n}|^2 d\mathbf{n} = 8\pi \frac{L^3}{c^3} \nu^2 d\nu \quad (2.2)$$

donde el factor 2 tiene en cuenta las dos posibles polarizaciones para cada número de onda. Rayleigh se dio cuenta de que en mecánica estadística (clásica) la energía de un sistema que se puede considerar como una colección de osciladores armónicos es lineal con la temperatura (con constante de proporcionalidad la constante de Boltzmann k_B). Si tal suposición se puede aplicar a la radiación, la densidad de energía de la radiación en el intervalo diferencial de temperaturas considerado sería lo que se ha venido en conocer como la fórmula de Rayleigh-Jeans³:

$$\rho(\nu, T)d\nu = \frac{\bar{E}(T)N(\nu)d\nu}{L^3} = \frac{8\pi k_B T \nu^2 d\nu}{c^3} \quad (2.3)$$

¹J.W. Strutt, Verh. d. deutsch. phys. Ges. **2**, 65 (1900)

²Cada modo normal se caracteriza por tanto por tal triplete de enteros $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ y un estado de polarización -dextrógiro o levógiro-.

³Derivada por Rayleigh pero James Jeans (1877-1946) corrigió en 1905 un error numérico cometido por el primero.

Para ν/T pequeños, la fórmula predecía correctamente las medidas experimentales, sin embargo fallaba para valores grandes de tal cociente. De hecho, si supusiéramos que tal fórmula describe correctamente todo el rango de frecuencias, la energía total a una temperatura T dada ($\int d\nu \rho(\nu, T)$) sería infinita, lo que se conoce con el nombre de *catástrofe ultravioleta*.

El resultado correcto fue descubierto y publicado por Max Planck (figura 1) en el mismo volumen de las actas de la Sociedad Alemana de Física⁴.

Planck se dio cuenta de que los datos eran bien ajustados por la siguiente curva:

$$\rho(\nu, T)d\nu = \frac{2h}{c^2} \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad (2.4)$$

donde h era una nueva constante que se acabó por conocer como *constante de Planck*, denominada por el propio Planck como “cuanto de acción” (*Wirkungsquantum* en alemán) precisamente porque sus unidades son las de la acción de un proceso físico (energía por tiempo). Experimentalmente por comparación se obtenía $k_B \approx \times 10^{-23}$ J/K y $h \approx 6.6 \times 10^{-34}$ J · s.

Tal expresión fue obtenida mediante tanteo por Planck, pero más adelante dio una derivación de ésta. Para ello asumió que la radiación era la misma que si estuviera en equilibrio con un conjunto enorme de osciladores cargados con diferentes frecuencias, siendo la energía de cualquiera de éstos de energía ν un múltiplo entero de veces su constante, $h\nu$.

No entraremos en su derivación aquí. Solo comentar que para $\nu T^{-1} \ll kh^{-1}$ proporciona la fórmula de Rayleigh, pero para $\nu T^{-1} \gg kh^{-1}$ decae exponencialmente, resultando en una energía total finita y proporcional a la cuarta potencia:

$$\int_0^\infty \rho(\nu, T)d\nu = \sigma_B T^4, \quad \sigma_B \equiv \frac{2\pi^5 k_B^4}{15h^3 c^2} \quad (2.5)$$

(con σ_B la constante de Stefan-Boltzmann).

Quizás la utilidad más inmediata del trabajo de Planck fue encontrar los valores de las constantes atómicas. Es sabido que para los gases ideales se tiene que $pV = nRT$, con p la presión del gas, V el volumen ocupado, n el número de moles y T su temperatura. Para la constante restante se tiene que $R = k_B N_A$ con N_A el número de Avogadro. Conocidos los valores de R y k_B (el segundo gracias a la ley de Planck) se pudo inferir N_A . La medida de N_A permitió la medida precisa de la carga del electrón por experimentos electrolíticos, medidas más precisas que cualquier otra posible llevada a cabo por la época, y dado que J.J. Thomson había medido el ratio carga/masa de un electrón experimentando con rayos catódicos, esto permitía por tanto obtener la masa del electrón también⁵.

La cuantización de Planck es aplicada a la materia que absorbe y emite energía, no a la radiación en sí.



Figura 1: Max Planck (1858-1947). Nacido en Kiel, asistió al Maximilian Gymnasium en Múnich y estudió física allí también. Su tesis doctoral versó sobre la segunda ley de la termodinámica. Obtuvo la plaza de profesor titular en Berlín en 1892 tras haber pasado por diversas universidades. Ganó el premio Nobel de física en 1918.

⁴M. Planck, Verh. d. deutsch. phys. Ges. **2**, 202 (1900)

⁵De hecho todo esto se podía haber hecho antes, pues la fórmula de Rayleigh es correcta para pequeñas frecuencias por lo que por comparación con experimentos en ese rango se podía obtener todo lo dicho.

Sería Albert Einstein (1879-1955) quien en 1905 propondría que la energía de una radiación de frecuencia ν debía ser un múltiplo entero de h veces esta frecuencia en su artículo “Sobre un punto de vista heurístico concerniente a la producción y transformación de la luz”⁶.

Tras elogiar la teoría ondulatoria de la luz por su buena descripción de los fenómenos ópticos, añade

“Deberíamos tener en cuenta, sin embargo, que las observaciones ópticas se refieren a promedios temporales antes que a valores instantáneos; y es perfectamente concebible [...] que la teoría de la luz, que opera con funciones espaciales continuas, lleve a contradicciones cuando se aplique a los fenómenos de emisión y transformación de la luz. De hecho, creo que las observaciones de la «radiación de cuerpo negro», fotoluminiscencia, producción de rayos catódicos por luz ultravioleta, y otros fenómenos relacionados asociados con la emisión y transformación de luz parecen entenderse más fácilmente si se supone que la energía de la luz está distribuida por el espacio de forma discontinua.”

Einstein usó tal suposición para predecir que en el efecto fotoeléctrico no se emiten electrones cuando la luz que ilumina un metal no alcanza una frecuencia umbral ν_{\min} , donde $h\nu_{\min}$ es la energía para arrancar un único electrón del metal (la “función trabajo.” “función de extracción”). Experimentos posteriores por Robert Millikan (1868-1953) entre 1914 y 1916 verificaron esta expresión, obteniendo un valor para h cercano al obtenido de la radiación de cuerpo negro.

La derivación de la densidad de energía hecha por Hendrik Lorentz (1853-1928) en 1910⁷ muestra mejor la conexión entre la hipótesis de Einstein y la fórmula de Planck: de la mecánica estadística se sabe que la probabilidad de que en un sistema que contiene un gran número de subsistemas en equilibrio térmico a temperatura T uno posea la energía E es proporcional a $e^{-E/k_B T}$. Si la energía de la radiación estuviera continuamente distribuida, tendríamos:

$$\bar{E} = \frac{\int_0^{\infty} e^{-E/k_B T} E dE}{\int_0^{\infty} e^{-E/k_B T} dE} = k_B T \quad (2.6)$$

que nos devuelve la densidad de energía de Rayleigh-Jeans, mientras que si las energías han de ser múltiplos enteros de $h\nu$:

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} e^{nh\nu/k_B T} nh\nu}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{nh\nu/k_B T}} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_B T} - 1} \quad (2.7)$$

que nos devuelve la densidad de energía de la fórmula de Planck.

El escepticismo hacia los *quanta* de Einstein tuvo que afrontar una segunda y dura prueba⁸: los experimentos de dispersión de rayos X realizados por Arthur Compton (1892-1962) entre 1922 y 1923⁹. Los rayos X son lo suficientemente energéticos para que la energía

⁶A. Einstein, Ann. d. Physik **17** (1905)

⁷H.A. Lorentz, Phys. Z. **11m** 1234 (1910)

⁸De hecho, en 1924 Bohr, Slater y Kramers publicaron un artículo titulado “Teoría cuántica de la radiación”, en el cual se proponía la conservación estadística de la energía. La explicación del efecto Compton termina de enterrar tal hipótesis ya de por sí rechazada.

⁹A.H. Compton, Phys. Rev. **21**, 207 (1923)

de ligadura del electrón sea despreciable, y podamos considerar que un fotón choca contra un electrón *libre*. Por conservación del cuadrimomento en el choque se llega a que el cambio en la longitud de onda del fotón tras el choque será

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta) \quad (2.8)$$

con m_e la masa del electrón y θ el ángulo del fotón dispersado respecto a la dirección de incidencia.

La verificación experimental de esta expresión debió convencer a los físicos de la realidad de los “cuanta” de luz, conocidos desde entonces por *fonones*, nombre dado por el químico G.N. Lewis.

2.2 Espectro atómico

El segundo problema importante que los físicos de finales del siglo XIX y principios del XX tuvieron que afrontar fue la explicación de los espectros atómicos. Se había descubierto en el s. XIX que los gases emitían y absorbían radiación solo en determinadas frecuencias definidas. A tal conjunto de frecuencias se le conoce como el espectro del elemento del gas en cuestión. Esto se volvió un potente método de análisis químico y de descubrimiento de nuevos elementos tales como el Helio, descubierto por estudios del espectro del Sol. Pero la explicación de porqué las frecuencias eran ésas se resistía.

Para entender sus dificultades a la hora de entender el *espectro atómico*, debemos conocer qué *modelos atómicos* se sucedieron. Tras el descubrimiento del electrón por Thomson, su modelo atómico del pudding de pasas cobró fuerza: se imaginaba que el átomo era una masa positiva con los electrones incrustados en ella. Los posteriores experimentos de Ernest Rutherford (1871-1937) en la Universidad de Manchester entre 1909 y 1911 cambiarían esta visión. En su famoso experimento de la lámina de oro¹⁰; realizado con Hans Geiger (1882-1945) (su estudiante de post-doctorado) y Ernest Mardsen (1889-1970) (estudiante de física), encontraron que las partículas alfa¹¹ de un haz colimado que colisionaban contra una lámina de oro apenas alteraban su trayectoria, pero algunas se desviaban ángulos inversosímiles llegando a quedar ante la pantalla. En una colisión entre dos partículas, una de masa M a velocidad v y otra m en reposo, la primera solo puede rebotar si la masa de la segunda es menor pues se encuentra que

$$v' = -v \left(\frac{m - M}{m + M} \right) \quad (2.9)$$

con v' la velocidad tras el choque (hemos supuesto que van en la misma dirección tras el choque por simplicidad). Dado que las únicas partículas para colisionar en el modelo de Thomson eran los electrones y éstos eran mucho menos masivos que las partículas alfa, el “rebote” lo debía estar ocasionando otra cosa. Citando al propio Rutherford:

“It was quite the most incredible event that has ever happened to me in my life. It was almost as incredible as if you fired a 15-inch shell at a piece of tissue paper, and it came back and hit you.” (Sacado de la referencia [1])

¹⁰Publicado en *Philosophical Magazine*, 6, vol. 21 (mayo de 1911) con el título “The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom”.

¹¹El propio Rutherford demostraría que son núcleos de Helio.

En la referencia [1] se ilustran entorno a este punto unos cálculos muy instructivos: si suponemos que la carga de los átomos del blanco es $+Ze$ y como las de las partículas alfa es $+2e$, en aras de frenarla a una distancia r del blanco la energía cinética de la partícula; $Mv^2/2$ ha de convertirse en energía potencial $(2e)(Ze)/r$ de donde como la velocidad a la que se emiten las partículas alfa del átomo de radio es de 2.09×10^9 : cm/s se tiene que $r \sim 3Z \times 10^{-14}$ cm, que incluso para un átomo grande ($Z \sim 100$) es mucho más pequeño que el tamaño del átomo de oro (unas pocas veces 10^{-8} cm).

Rutherford concluyó que la carga positiva del átomo esta concentrada en un pequeño y pesado núcleo, alrededor del cual la mucho más ligera carga negativa en forma de electrones orbitan:

“Al comparar la teoría esbozada en este artículo con los resultados experimentales, se ha supuesto que el átomo consiste en una carga central concentrada en un punto, y que las grandes desviaciones individuales de las partículas α y β son debidas principalmente a su paso a través del intenso campo central.” (Sacado de la referencia [4])

El problema surge de que la electrodinámica clásica (las ecuaciones de Maxwell) predice que una partícula acelerada radía energía en forma de ondas electromagnéticas, de tal suerte que se *precipitaría* describiendo una espiral contra el núcleo en un tiempo tan corto que la materia tal y como la conocemos no existiría pues sería inestable en nuestra escala temporal.

La respuesta vino en 1913 de la mano de un joven visitante (y futuro discípulo) al laboratorio de Rutherford de Manchester, Niels Bohr (1885-1962) (ver figura 2).



Figura 2: Niels Bohr (1885-1962). Nacido en Copenhague y doctorado en su universidad en 1911, consiguiendo su plaza de profesor en 1916. Fue discípulo de Rutherford.

Bohr propuso en su artículo “Sobre la constitución de átomos y moléculas”¹² en primer lugar que las energías de los átomos están cuantizadas, en el sentido de que solo se dan ciertas energías definidas, luego el conjunto de energías posibles de un átomo es discreto. Propuso además que los átomos transitaban entre uno y otro estado mediante la absorción o emisión de paquetes discretos de energía, los *cuantos* de Planck y Einstein, de forma que la frecuencia de un fotón absorbido o emitido por el átomo en una transición entre los niveles $m \rightarrow n$ es

$$\nu = \frac{E_m - E_n}{h} \quad (2.10)$$

con E_i la energía del nivel i -ésimo.

Esto explicaba los espectros atómicos: una línea (clara u oscura) en el espectro se debe a átomos emitiendo u absorbiendo energías para *excitarse* o *desexcitarse* entre niveles concretos. Bohr además ofreció un método para calcular las energías E_n , al menos para un electrón en un campo coulombiano como el átomo de hidrógeno, o el de helio ionizado, etc, para el cual interpretaríamos que las energías del átomo son las propias energías mecánicas del electrón entorno a éste, que describe órbitas circulares de radio r estables sin radiar energía. Bohr se dio cuenta de que la constante de Planck tenía dimensiones de momento angular, por lo que supuso que el momento angular del electrón de velocidad v en su órbita es un número entero de veces la

¹² N. Bohr, Phil. Mag. **26**, 1,476,857 (1913); Nature **92**, 231 (1913)

constante (reducida) de Planck¹³:

$$m_e v r = n \hbar, \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad n \in \mathbb{N} \quad (2.11)$$

Por la segunda ley de Newton junto con la fuerza de Coulomb y por la ecuación para la energía:

$$\begin{aligned} \frac{m_e v^2}{r} &= \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \\ E &= \frac{m_e v^2}{2} - \frac{Z e^2}{r} \end{aligned} \quad (2.12)$$

se obtiene que

$$v = \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 n \hbar}, \quad r = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{Z m_e e^2}, \quad E = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{32\pi^2 \epsilon_0^2 n^2 \hbar^2} \quad (2.13)$$

por la relación de Einstein entre energía y frecuencia, la frecuencia de un fotón emitido en una transición de un estado n a otro $m < n$ es

$$\nu = \frac{Z^2 e^4 m_e}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (2.14)$$

Para encontrar \hbar , Bohr apeló al principio de correspondencia por el cual los resultados de la física clásica debían aparecer para órbitas grandes (n grande). Para $n \gg 1$ y $m = n-1$, (2.14) nos da $\nu = Z^2 e^4 m_e / 16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^3$ mientras que (2.13) nos da para la frecuencia $\nu/2\pi r = Z^2 e^2 m_e / 32\pi^3 \epsilon_0^2 n^3 \hbar^3$ por lo que por la electrodinámica clásica, que establece que la radiación emitida tendría la misma frecuencia que el electrón en su órbita, se tiene:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (2.15)$$

Usando el valor de h obtenido a partir de la ley de Planck, Bohr pudo obtener valores numéricos para el radio de las órbitas y la energía del electrón:

$$r \approx n^2 \times 0.529 Z^{-1} \times 10^{-8} \text{ cm}, \quad E \approx -\frac{13.6 Z^2 \text{ eV}}{n^2} \quad (2.16)$$

Los niveles de energía inferidos experimentalmente de la espectroscopía estaban en gran acuerdo con la expresión anterior, lo que significaba que Bohr iba por buen camino.

Como hemos visto la constante reducida de Planck se obtiene exigiendo que a tamaños macroscópicos la nueva teoría reproduzca lo anterior, pero de hecho para órbitas pequeñas las frecuencias de los cuantos emitidos no coinciden con la del electrón. Por ello la teoría de Bohr representa un paso más allá de la física clásica.

Las fórmulas deducidas por Bohr no solo podían usarse para el hidrógeno ($Z = 1$) sino también aunque toscamente para las órbitas más cercanas al núcleo de átomos más pesados, donde otros electrones no apantallan al que nos interesa; el cual *vería* al núcleo con carga Ze ¹⁴. Para $Z \gtrsim 10$ la frecuencia de un fotón emitido por la transición del

¹³De hecho, Bohr no uso el símbolo \hbar , así que temporalmente supongámosla otra constante más.

¹⁴De hecho, también son válidas para las órbitas más externas de los átomos pesados, donde el electrón *ve* toda la carga del núcleo apantallada y por tanto Z es del orden de la unidad. Eso explica que el tamaño de los átomos pesados no sea mucho mayor que el de los ligeros, y que las frecuencias de la luz emitidas por éstos sean parecidas a las del hidrógeno; es decir, estén en el rango del visible.

segundo al primer nivel esta ya en el rango de los rayos X. Midiendo la energía de estas emisiones, H.G.J. Moseley (1887-1915) fue capaz de encontrar Z para un gran rango de átomos desde calcio a zinc. Descubrió que, dentro del error experimental, Z era un número entero lo que sugería que el núcleo se compone de partículas de carga $+e$, mucho más pesadas que el electrón, a los cuales Rutherford les dio el nombre de *protones*. Se propuso que los núcleos se componían solo de protones, y los átomos serían estos núcleos con los electrones orbitando. Pero aparte de la inestabilidad de tener protones (cargas positivas) tan cerca, se dieron cuenta de que conforme mayor era el número atómico menos cierto era que su masa era Z veces la del protón. Por tanto, Rutherford introdujo el neutrón como una partícula neutra cuya masa era parecida a la del protón, compensando así este defecto de masa y manteniendo neutro al átomo. En 1932, James Chadwick (1891-1974) descubrió tal partícula pero eso se aleja de nuestros propósitos en este trabajo.

La teoría de Bohr es únicamente válida para órbitas circulares, pero en analogía al sistema solar se penso que las órbitas en un campo coulombiano (que es un campo central con la misma dependencia con la distancia que el campo gravitatorio) en general debían ser elípticas. Una generalización de la condición de cuantización de Bohr vino por parte de Arnold Sommerfeld (1868-1951) en 1916¹⁵, y usada por él para calcular las energías de los electrones en estas órbitas. Para un sistema con Hamiltoniano $H(q,p)$, donde las coordenadas generalizadas y sus variables canónicas conjugadas poseen una dependencia temporal periódica (como es el caso para órbitas cerradas), propuso que la acción estaría cuantizada como sigue

$$\oint pdq = nh \quad (2.17)$$

Es decir, la acción es un número entero de veces el cuanto de acción.

Fijémonos que si q es el ángulo trazado por el electrón en su órbita y p el momento angular, (2.17) nos devuelve la condición de Bohr. Profundizar en esta vía no es de interés, pues como veremos se torna obsoleta con la llegada de la mecánica ondulatoria y matricial.

Lo que si es de interés es, previo a pasar a hablar de las mecánicas ondulatoria y matricial, hablar de unas ideas introducidas por Einstein. En 1916 (pleno apogeo de su teoría de la relatividad general), Einstein volvió a la teoría de radiación del cuerpo negro combinándola con la idea de Bohr de niveles energéticos cuantizados¹⁶. Einstein definió la cantidad A_m^n como el ratio en el cual un átomo espontáneamente realizaría una transición de un estado m a otro n de menor energía, emitiendo un fotón de energía $E_m - E_n$. Además, consideró la absorción de fotones de radiación (no necesariamente de cuerpo negro) con una densidad de energía $\rho(\nu)d\nu$ para frecuencias entre $[\nu, \nu + d\nu]$. El ratio al cual un átomo individual en tal campo realiza una transición e un estado n a un estado m de mayor energía se escribe $B_n^m \rho(\nu_{nm})$, donde $\nu_{nm} = (E_m - E_n)/h$ es la frecuencia del fotón absorbido. Einstein también tomo en cuenta la posibilidad de que la radiación estimulase la emisión de fotones por el átomo en transiciones de un estado m a un estado n de menor energía, en un ratio escrito como $B_m^n \rho(\nu_{nm})$. Los coeficientes B_n^m y B_m^n como A_m^n se asumen dependientes solo de las propiedades del átomo, no de la radiación.

Einstein demostró que, para que la radiación en el cuerpo negro estuviese en equilibrio térmico, se podían relacionar mediante las siguientes ecuaciones:

$$B_m^n = B_n^m, \quad A_m^n = \left(\frac{8\pi h \nu_{nm}^3}{c^3} \right) B_m^n \quad (2.18)$$

¹⁵A. Sommerfeld, Ann. d. Physik **51**, 1(1916)

¹⁶A. Einstein, Phys. Z. **18**, 121 (1917)

Estas fórmulas resultaron adecuarse bien a los experimentos, y servirían de inspiración para que Heisenberg propusiera partir de lo que los experimentos revelaban acerca de la naturaleza, y no de lo que creíamos saber.

3 Dualidad onda-corpúsculo. Louis de Broglie

Desde Maxwell, la luz se ha entendido como un fenómeno ondulatorio: una onda de campos eléctricos y magnéticos. Tras Einstein y Compton, se vio claramente que también se manifestaba como una partícula; un fotón. No es de extrañar que pronto se extrapolase tal comportamiento en la dirección opuesta. ¿Podían manifestar comportamiento ondulatorio lo que siempre se había entendido como partículas? Esta fue la propuesta del francés Louis De Broglie (ver figura 3) en su tesis (“Investigaciones sobre la teoría de los cuantos”) en 1924.

De Broglie se baso tanto en argumentos heurísticos (encontrar una dualidad en todas las partes en las que h fuera importante) como de analogías entre la mecánica teórica y la ondulatoria¹⁷.

Cualquier tipo de onda de frecuencia ν u número de onda \mathbf{k} posee una dependencia espaciotemporal de la forma $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t)$, con $\omega = 2\pi\nu$. La invarianza Lorentz de esta expresión requiere que $k^\mu \equiv (\omega, \mathbf{k})$ sea un cuadrivector tal como $p^\mu \equiv (E, \mathbf{p})$ lo es; es decir, que se transforme entre sistemas de referencia con la métrica de Minkowski: $k'^\mu = g^{\mu\nu} k_\nu$ (usamos el convenio de suma sobre índices repetidos de Einstein). Dado que para la luz, de acuerdo con Einstein, la energía de un fotón es $E = \hbar\omega$ y su momento $|\mathbf{p}| = E/c = h\nu/c = h/\lambda = \hbar|\mathbf{k}|$, de Broglie sugirió que en general a cualquier partícula de cualquier masa se le asocia una onda con el cuadrivector (ω, \mathbf{k}) igual a \hbar^{-1} veces el cuadrivector (E, \mathbf{p}) , y por tanto:

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad E = \hbar\omega \quad (3.3)$$

Esta idea ganó apoyo por el hecho de que una onda que satisfaga (3.3) tendría una velocidad de grupo igual a la velocidad ordinaria $c^2\mathbf{p}/E$ de una partícula de momento \mathbf{p} y energía E ¹⁸ de acuerdo con la relatividad especial.

En analogía a las ondas estacionarias que se forman en una cuerda sujeta por los extremos (por ejemplo en un violín) en la cual deben haber un número entero de semi-longitudes de onda, la onda asociada al electrón de acuerdo con de Broglie debía satisfacer lo análogo en su órbita de longitud $2\pi r$, es decir $2\pi r = n\lambda$ y de ello se deduce que:

$$p = \hbar k = n\hbar/r \longrightarrow rp = L = mvr = n\hbar \quad (3.4)$$

como Bohr había impuesto.

¹⁷De hecho, otra forma de encontrar la relación $p = h/\lambda$ es la siguiente: el principio de mínima acción establece que

$$\delta \int_a^b 2K dt = \delta \int_a^b \sqrt{2m[E - V(\mathbf{r})]} ds = 0 \rightarrow \delta \int_a^b p(\mathbf{r}, E) ds = 0 \quad (3.1)$$

Mientras que el de Fermat establece que a frecuencia constante

$$\delta \int_a^b \frac{ds}{v(\mathbf{r})} = \delta \int_a^b \frac{ds}{\lambda(\mathbf{r})} = 0 \quad (3.2)$$

y por comparación $p = A/\lambda$. Si tal relación ha de ser valida para toda partícula, y como en el foton ya es conocido que $p = h/\lambda$, se identifica $A = h$.

¹⁸Pues la velocidad de grupo (en 1D por simplicidad) es $v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{c^2 p}{E}$.



Figura 3: Louis Victor, duque De Broglie (1892-1987). Nacido en Dieppe. Estudiante en Sorbona de la historia medieval, el estallido de la Primera Guerra Mundial y su alistamiento desembocó en su interés en temas científicos.

Se cuenta que (ver la referencia [1]) en su defensa oral de la tesis, el jurado le preguntó a de Broglie por más evidencias que pudieran sustentar su propuesta de una teoría ondulatoria para el electrón, a lo que de Broglie sugirió que tal vez se pudieran observar fenómenos difractivos en la dispersión de electrones por un cristal. Este experimento fue llevado a cabo en los *Bell Telephone Laboratories* por Clinton Davisson (1881-1958) y Lester Germer (1896-1971), quienes en 1927 reportaron que electrones dispersados por un cristal de níquel mostraban un patrón de picos de difracción similar al producido por rayos X¹⁹.

Era necesario ahora extender la idea del comportamiento ondulatorio no solo a partículas libres sino a partículas en un potencial, como el que el electrón siente en un átomo. Veremos que ésto fue hecho en 1926 por Erwin Schrödinger.

¹⁹C. Davisson and L. Germer, Phys. Rev. **30**, 707 (1927)

4 Mecánica Matricial. Werner Heisenberg

Unos pocos años después de que de Broglie introdujera el germen de la mecánica ondulatoria pero un poco antes de que Schrödinger la desarrollara, un muy diferente desarrollo de la mecánica cuántica fue desarrollado por Werner Heisenberg (1901-1976) (ver figura 4).

Hasta 1920 la enseñanza y desarrollo de la teoría de Bohr se restringía a la propia universidad de Bohr (Copenhague) y la de Sommerfeld (Munich). Se debe a Born y Franck introducirla en Gotinga (destaca el conocido como “festival Born” con discusiones acerca del modelo de Bohr-Sommerfeld. Entre la audiencia se contaban participantes de futuro renombre como Heisenberg y Pauli, discípulos de Sommerfeld).

“Sobre la mecánica cuántica” es el título de un artículo de Born de 1924. En él, para estudiar la interacción entre radiación y átomos, asumió que un átomo en un estado estacionario n se puede reemplazar por un conjunto de osciladores virtuales de frecuencia

$$\nu_{nm} = (E_n - E_m)/h \quad (4.1)$$

A cada resonador le corresponde un término de la serie de Fourier del movimiento en el estado n . Esta idea como veremos será usada por Heisenberg.

En abril de 1925; en Gotinga, Heisenberg trató de conjeturar las intensidades de las líneas del hidrógeno fracasando. Concluyó que se debía romper con la cinemática de la mecánica clásica y abandonar la idea de trayectoria de un electrón, aunque no así de poseer una ecuación de movimiento para éste.

Mientras pasó por la fiebre del heno en la isla de Helgoland para alejarse del ambiente de Gotinga, no dejaba de pensar en el misterio que rodeaba a las condiciones de Bohr y al desarrollo de de Broglie. A su vuelta a la Universidad de Gotinga, había desarrollado un nuevo acercamiento a las condiciones cuánticas que se acabó por conocer como *mecánica matricial* ²⁰.

El punto de partida de Heisenberg fue el juicio filosófico de que en una teoría física no debía haber cabida para sucesos no observables, tales como las órbitas de los electrones en un átomo. Se apoyó por tanto en las energías E_n de los estados atómicos y en los ratios A_m^n en los cuales los átomos espontáneamente experimentan transiciones radiativas de un estado m a otro n como observables de su nueva teoría. Destaquemos la siguiente frase de su artículo de 1925:

“ It seems sensible to discard all hope of observing hitherto unobservable quantities, such as the position and period of the electron... Instead it seems more reasonable to try to establish a theoretical quantum mechanics, analogous to classical mechanics, but in which only relations between observable quantities occur. ”

En electrodinámica clásica, una partícula con carga $\pm e$ y un vector de posición \mathbf{x} que sufre un movimiento oscilatorio armónico emite una potencia de radiación (usando unidades



Figura 4: Werner Karl Heisenberg (1901-1976).

Natural de Würzburgo, fue ayudante de Max Born en Gotinga. Fue premio Nobel de física en 1932.

²⁰W. Heisenberg, Z. f. Physik **33**, 879 (1925)

gaussianas, ver referencia [8]):

$$P = \frac{4e^2}{3c^3} |\ddot{\mathbf{x}}|^2 \quad (4.2)$$

Heisenberg supuso que esta fórmula daría la potencia emitida en una transición radiativa entre un estado de energía E_m a otro de menor energía E_n , con lo que reemplazó el vector posición \mathbf{x}

$$\mathbf{x} \mapsto [\mathbf{x}]_{nm} \propto e^{-i\omega_{nm}t} \quad (4.3)$$

donde $[\mathbf{x}]_{nm}$ es una amplitud vectorial compleja que caracteriza la transición y $\omega_{nm} = \hbar^{-1}(E_m - E_n)$ la frecuencia (2π veces ésta) de la radiación emitida. Por tanto, la ecuación (4.2) pasa a

$$P(m \rightarrow n) = \frac{4e^2\omega_{nm}^4}{3c^3} |[\mathbf{x}]_{nm}|^2 \quad (4.4)$$

y por tanto, el ratio de fotones emitidos portadores de una energía $\hbar\omega_{nm}$ en la transición $m \rightarrow n$ es en la notación de Einstein:

$$A_m^n = \frac{P(m \rightarrow n)}{\hbar\omega_{mn}} = \frac{4e^2\omega_{nm}^3}{3c^3\hbar} |[\mathbf{x}]_{nm}|^2 \quad (4.5)$$

y de acuerdo a las relaciones de Einstein (referencia a las ecuaciones concretas) esto nos da los coeficientes de $\rho(\nu_{nm})$ en los ratios de emisión y absorción inducida:

$$B_n^m = B_m^n = \frac{2\pi e^2}{3\hbar^2} |[\mathbf{x}]_{nm}|^2 \quad (4.6)$$

En las ecuaciones (4.5) y (4.6) aparece $[\mathbf{x}_{nm}]$ y se dijo que $E_m > E_n$, pero Heisenberg extendió la definición de $[\mathbf{x}_{nm}]$ al caso en que $E_n > E_m$ añadiendo la condición de que:

$$[\mathbf{x}]_{nm} = [\mathbf{x}]_{mn}^* \propto e^{i\omega_{nm}t} \quad (4.7)$$

por lo que tales ecuaciones valen en ambos casos²¹.

Heisenberg limitó sus cálculos al ejemplo de un oscilador anarmónico en una dimensión, para el cual la energía esta dada clásicamente en términos de la posición y su derivada temporal como

$$E = \frac{m_e}{2} \dot{x}^2 + \frac{m_e\omega_0^2}{2} x^2 + \frac{m_e\lambda}{3} x^3 \quad (4.8)$$

Para calcular E_n y $[x]_{nm}$, Heisenberg usó dos relaciones: la primera es la interpretación mecanocuántica de (4.8):

$$\frac{m_e}{2} [\dot{x}^2]_{nm} + \frac{m_e\omega_0^2}{2} [x^2]_{nm} + \frac{m_e\lambda}{3} [x^3]_{nm} = E_n \delta_{nm} \quad (4.9)$$

con δ_{nm} la delta de Kronecker (que se define como 1 si $n = m$ y 0 si $n \neq m$). El significado dado por Heisenberg a los términos $[\dot{x}^2]_{nm}$, $[x^2]_{nm}$, y $[x^3]_{nm}$ es la “simple y natural asunción” de que

$$[x^2]_{nm} = \sum_l [x]_{nl} [x]_{lm}, \quad [x^3]_{nm} = \sum_{l,k} [x]_{nl} [x]_{lk} [x]_{km} \quad (4.10)$$

²¹Anticipamos ya que esta relación, entendiendo a $[x]_{nm}$ como una matriz, implica imponer que es hermítica

y de igual manera

$$[\dot{x}^2]_{nm} = \sum_k [\dot{x}]_{nk} [\dot{x}]_{km} = \sum_k \omega_{nk} \omega_{mk} [x]_{nk} [x]_{km} \quad (4.11)$$

donde se ha usado la dependencia de $[x]$ con t que Heisenberg asumió.

La segunda relación es una condición cuántica. Heisenberg adoptó una fórmula que había sido publicada un poco antes por W. Kuhn y W. Thomas, fórmula derivada usando un modelo de un electrón en un estado ligado como un conjunto de osciladores vibrando en tres dimensiones con frecuencias ν_{nm} . De la condición de que a muy alta frecuencia el escattering de la luz de tal electrón sería el mismo que si el electrón fuera una partícula libre, Kuhn derivó la siguiente fórmula (clásica):

$$\sum_m B_n^m (E_m - E_n) = \frac{\pi e^2}{m_e} \quad (4.12)$$

Combinándola con (4.6) se obtiene

$$\hbar = \frac{2m_e}{3} \sum_m |[\mathbf{x}]_{nm}|^2 \omega_{nm} \quad (4.13)$$

Dado que en tres dimensiones se tienen tres términos en $|[\mathbf{x}]_{nm}|^2$, en una dimensión el factor $1/3$ se suprimiría por lo que

$$\hbar = 2m_e \sum_m |[x]_{nm}|^2 \omega_{nm} \quad (4.14)$$

Ésta fue la condición cuántica usada por Heisenberg.

Heisenberg fue capaz de encontrar la solución exacta de las ecuaciones (4.9) y (4.14) para el caso $\lambda = 0$ (el ahora tan conocido por los estudiantes de física cuántica oscilador armónico)²²:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0, \quad [x]_{n+1,n}^* = [x]_{n,n+1} = e^{-i\omega_0 t} \sqrt{\frac{(n+1)\hbar}{2m_e \omega_0}} \quad (4.15)$$

con $[x]_{nm}$ nulo a no ser que $n - m = \pm 1$. También resolvió el caso para λ pequeño.

Todo esto era poco menos que oscuro cuando Heisenberg lo desarrolló. A su vuelta a Helgoland, Heisenberg le enseñó su trabajo a Max Born (1882-1970) que los hizo públicos. Born y Jordan reconocieron sus cálculos como casos especiales de un procedimiento matemático conocido como producto matricial. Una matriz es un arreglo de elementos en filas y columnas. Si lo denotamos como $[A]_{nm}$, nos referimos al elemento en la matriz A en la n -ésima fila y la m -ésima columna. El producto entre dos matrices es

$$[AB]_{nm} \equiv \sum_l [A]_{nl} [B]_{lm} \quad (4.16)$$

²²De hecho, Heisenberg erró en la dependencia temporal, tomando $\cos(\omega_{nm}t)$ en lugar de la exponencial. El resultado aquí expuesto es para la exponencial.

La peculiaridad más llamativa de las matrices es su no-conmutatividad: en general, el producto AB es distinto del producto BA .

La condición cuántica (4.14) nos permite escribir lo siguiente: podemos definir una matriz *momento* tal que

$$[p]_{nm} = m_e [\dot{x}]_{nm} = -im_e \omega_{nm} [x]_{nm} \quad (4.17)$$

donde hemos usado la dependencia temporal supuesta para $[x]_{nm}$. Si realizamos los productos $[px]$ y $[xp]$, las componentes de la diagonal serán

$$\begin{aligned} [px]_{nn} &= \sum_m [p]_{nm} [x]_{mn} = -im_e \sum_m \omega_{nm} |[x]_{mn}|^2 \\ [xp]_{nn} &= \sum_m [x]_{nm} [p]_{mn} = -im_e \sum_m \omega_{mn} |[x]_{mn}|^2 \end{aligned} \quad (4.18)$$

donde se ha usado que $[x]_{nm} = [x]_{mn}^*$. Como $\omega_{nm} = -\omega_{mn}$, $[px]_{nn} = -[xp]_{nn}$, y la condición cuántica (4.14) se puede escribir de dos maneras:

$$i\hbar = -2[px]_{nn} = +2[xp]_{nn} = [xp]_{nn} - [px]_{nn} = [xp - px]_{nn} \quad (4.19)$$

fórmula en la cual reconocemos la relación de conmutación (se llama conmutador de dos operadores $[A, B]$ a $AB - BA$) icónica de la mecánica cuántica.

Poco después de la publicación del artículo de Heisenberg, Born y Jordan la extendieron para el caso general de $xp - px$:

$$xp - px = i\hbar I \quad (4.20)$$

con I la matriz identidad, cuyos elementos son $[I]_{nm} = \delta_{nm}$. Es decir, no solo tenemos los elementos diagonales del conmutador de x con p sino que se ha extendido tal relación, resultando que los elementos no diagonales de tal conmutador son nulos. Born y su asistente Pascual Jordan (1902-1984)²³, dieron una demostración equívoca de este hecho basándose en las ecuaciones de movimiento derivadas del Hamiltoniano. Paul Dirac²⁴ simplemente las asumió en analogía a los corchetes de Poisson de mecánica clásica, que establecen que $\{q_n, p_m\} = \delta_{nm}$ (una “regla de cuantización” dada por Dirac es que los corchetes de Poisson se relacionaban con el conmutador de la cuántica como $\{, \} \rightarrow (i\hbar)^{-1}[,]$). Dirac publicó sus resultados en octubre de 1925 bajo el título “Ecuaciones fundamentales de la mecánica cuántica” donde resume las ideas de Heisenberg y deriva las ecuaciones de evolución que hoy conocemos como ecuaciones de Heisenberg:

$$i\hbar \frac{dA}{dt} = [A, H] \quad (4.21)$$

con A un operador.

Dirac también publicaría en 1932 su famoso libro *The principles of Quantum Mechanics* que todavía hoy es referencia obligada en el estudio de la mecánica cuántica, y de hecho fundamenta la enseñanza hasta nuestros días habiendo sufrido ésta pocas variaciones respecto a la que él mostro en su libro.

Más adelante, Heisenberg inicia junto a Born y Jordan el trabajo que dio consistencia y base formal a la mecánica matricial (“three-man paper” o *trabajo de los tres hombres*

²³P. Jordan, Z. f. Physik **858** (1925)

²⁴P.A.M. Dirac, Proc. Roy. Soc. Lond. A **109**, 642 (1926)

-Dreimännerarbeit en alemán-), hablando de valores y vectores propios, transformaciones canónicas, formas cuadráticas de Hilbert, relaciones generales de conmutación, e incluso la cuantización del campo electromagnético.

Pese a que la mecánica matricial tuvo un rápido desarrollo, calculando correctamente las energías del oscilador armónico y del átomo de hidrógeno²⁵, su complicado formalismo la hacía poco menos que inútil para enfrentar sistemas más complejos, tales como la molécula de hidrógeno. La mecánica ondulatoria por tanto se impondría a la matricial por ser más intuitiva entre las herramientas usadas por los físicos de la época.

²⁵De hecho, su cálculo no es sencillo: fue realizado de manera brillante por Wolfgang Pauli (1900-1958), un estudiante de Sommerfeld.

5 Mecánica ondulatoria. Erwing Schrödinger

Erwin Schrödinger (ver figura 5) desarrolló las ideas de De Broglie, desarrollo que desembocó en su mecánica ondulatoria²⁶. El austríaco había trabajado en una gran variedad de campos, incluyendo radiactividad, relatividad general, termodinámica y teoría de los gases, pero no había mostrado interés en espectroscopía o teoría atómica. De hecho, era conocedor de la teoría de Heisenberg aunque no le inspiraba confianza. En uno de sus artículos de 1926 escribió:

“ *I was absolutely unaware of any genetic relationship with Heisenberg. I naturally knew about this theory, but because of the to me very difficult-appearing methods of transcendental algebra and because of the lack of visualizability [Anschaulichkeit], I felt deterred by it, if not to say repelled* ” (sacado de [7])

Schrödinger hizo esto adaptando el principio de Hamilton-Jacobi de la formulación de la mecánica clásica aunque es demasiado extenso para reproducirlo aquí.



Figura 5: Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger (1887-1961). Nació en Erdberg (Viena). Recibió el premio Nobel de física en 1933 por su ecuación homónima.

Sin embargo, se puede entender intuitivamente como una extensión del formalismo de de Broglie. De acuerdo a éste, denotando por $\psi \propto e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)}$ a la función que describe a una partícula (cuyo comportamiento es ondulatorio) de momento $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ y energía $E = \hbar\omega$ se tiene que ψ satisface las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$\begin{aligned} -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{p}\psi(\mathbf{x}, t) \\ i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= E\psi(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (5.1)$$

por lo que se extrae el *principio de correspondencia* de la mecánica cuántica:

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla, \quad E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad (5.2)$$

Para cualquier estado de energía E dada, se tiene que podemos escribir

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\mathbf{x}) \quad (5.3)$$

Para una partícula libre en el caso no relativista se tiene que $E = \mathbf{p}^2/2m$ luego

$$E\psi(\mathbf{x}) = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{x}) \quad (5.4)$$

o de forma más general, para una partícula en un potencial $V(\mathbf{x})$

$$E\psi(\mathbf{x}) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] \psi(\mathbf{x}) \quad (5.5)$$

que es de hecho la ecuación de Schrödinger para una partícula de energía E .

Tal como ocurre para las frecuencias de vibraciones transversales de una cuerda sujeta por sus extremos, la ecuación (5.5) solo posee soluciones para ciertos valores definidos de

²⁶E. Schrödinger, Ann. d. Physik **79**,361, 409 (1926))

E. Las condiciones de contorno que se le imponen a $\psi(\mathbf{x})$ son que es univaluada (vuelve al mismo valor si \mathbf{x} describe una curva cerrada) y tiende a cero si $|\mathbf{x}|$ tiende a infinito. Schrödinger fue capaz de probar que en un potencial coulombiano; $V(r) = -Ze^2/r$, las soluciones de su ecuación se daban a las energías

$$E_n = \frac{-Z^2 e^4 m_e}{32\pi^2 \epsilon_0^2 n^2 \hbar^2} \quad (5.6)$$

y no se encontraban soluciones para otras que no fueran éstas.

Como vemos, las energías encontradas por Schrödinger coinciden de manera exactas con las proporcionadas por el modelo de Bohr. La cuantización y la aparición de números enteros surge aquí como mera consecuencia de la resolución de la ecuación diferencial, algo que ya ocurría de manera clásica. De hecho, Schrödinger comenta en su primer artículo que

“The essential thing seems to me to be, that the postulation of “whole numbers” no longer enters into the quantum rules mysteriously, but that we have traced the matter a step farther back, and found the “integralness” to have its origin in the finiteness and single-valuedness of a certain space function.”

A las ecuaciones diferenciales como la aquí expuesta que solo poseen solución en para un conjunto discreto de valores se les llama ecuaciones en autovalores, y por ello Schrödinger tituló a su artículo “*La cuantización como problema de valores propios*” (ver la referencia [4]) y de hecho, la ecuación (5.5) es una ecuación de autovalores del operador Hamiltoniano (entre corchetes en el miembro derecho).

La ecuación de Schrödinger es generalizable a sistemas mayores: si un sistema es descrito por el Hamiltoniano $H(\mathbf{x}_1, \dots; \mathbf{p}_1, \dots)$ la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$H(\mathbf{x}_1, \dots; -i\hbar\nabla_1, \dots)\psi_n(\mathbf{x}_1, \dots) = E_n\psi_n(\mathbf{x}_1, \dots) \quad (5.7)$$

donde para un sistema no relativista en un potencial general $V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ tenemos $H = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$.

Por tanto, el formalismo desarrollado por Schrödinger y que se ha venido a conocer como *mecánica ondulatoria* es más potente que el desarrollado por Bohr: ahora era posible en principio calcular el espectro no solo del hidrógeno, sino de cualquier otro átomo. De hecho, Schrödinger en su artículo lo aplica entre otras cosas al cálculo de los estados rotacionales de lo que sería una molécula diatómica.

Pero no debemos pensar que las mecánicas ondulatorias y matricial son teorías diferentes: en 1926, Schrödinger demostró como los principios de la mecánica matricial se derivaban de los de la mecánica ondulatoria ²⁷. Y como ya se ha dicho, Dirac presentó un nuevo formalismo conocido como *teoría de transformaciones*, de donde ambas mecánicas (matricial y ondulatoria) pueden ser derivadas.

²⁷E. Schrödinger, Ann. d. Physik **79**, 734 (1926)

6 Conclusiones

Este trabajo nos ha permitido aprender de cerca las ideas involucradas en el desarrollo de la teoría cuántica, teoría que supuso una revolución tanto intelectual como tecnológica en el siglo pasado.

Hemos visto un acercamiento a ésta mediante las ideas originales de los científicos que las desarrollaron, con sus idas y venidas; influencias y desarrollos. Es interesante ver este punto de la física, pues ésta no posee un desarrollo lineal al que nos acostumbran los libros de texto, y mucho de su avance tiene que ver con suposiciones y pasos en falso (o a ciegas) esperando arribar a buen puerto.

Por tanto, espero que este trabajo sirva al lector (tal y como ha servido a su autor) para disfrutar y respetar las ideas y a las personas que las desarrollaron, y no solo entender y valorar la ciencia como el producto final que el tiempo pule y nos presenta.

Referencias

- [1] WEINBERG, S., *Lectures on Quantum Mechanics*. Cambridge University Press. (2013)
- [2] MESSIAH, A., *Quantum Mechanics*. Dover Publications
- [3] SOLBES, J.; SINARCAS, V., *Utilizando la historia de la ciencia en la enseñanza de los conceptos claves de la física cuántica Didáctica de las ciencias experimentales y sociales*, N°23,2009, 123-151
- [4] HAWKING, S., *Los sueños de los que está hecha la materia*. Ed. Crítica. (2016)
- [5] SOLÍS, C.; SELLÉS, M., *Historia de la Ciencia* Editorial Espasa (2005)
- [6] GAMOW, G., *Biografía de la Física*. Biblioteca General Salvat. (1971)
- [7] KRAGH, H., *Quantum Generations: a history of physics in the twentieth century* Princeton University Press (1999)
- [8] JACKSON, J.D., *Classical Electrodynamics*. Ed. Wiley. Third Edition