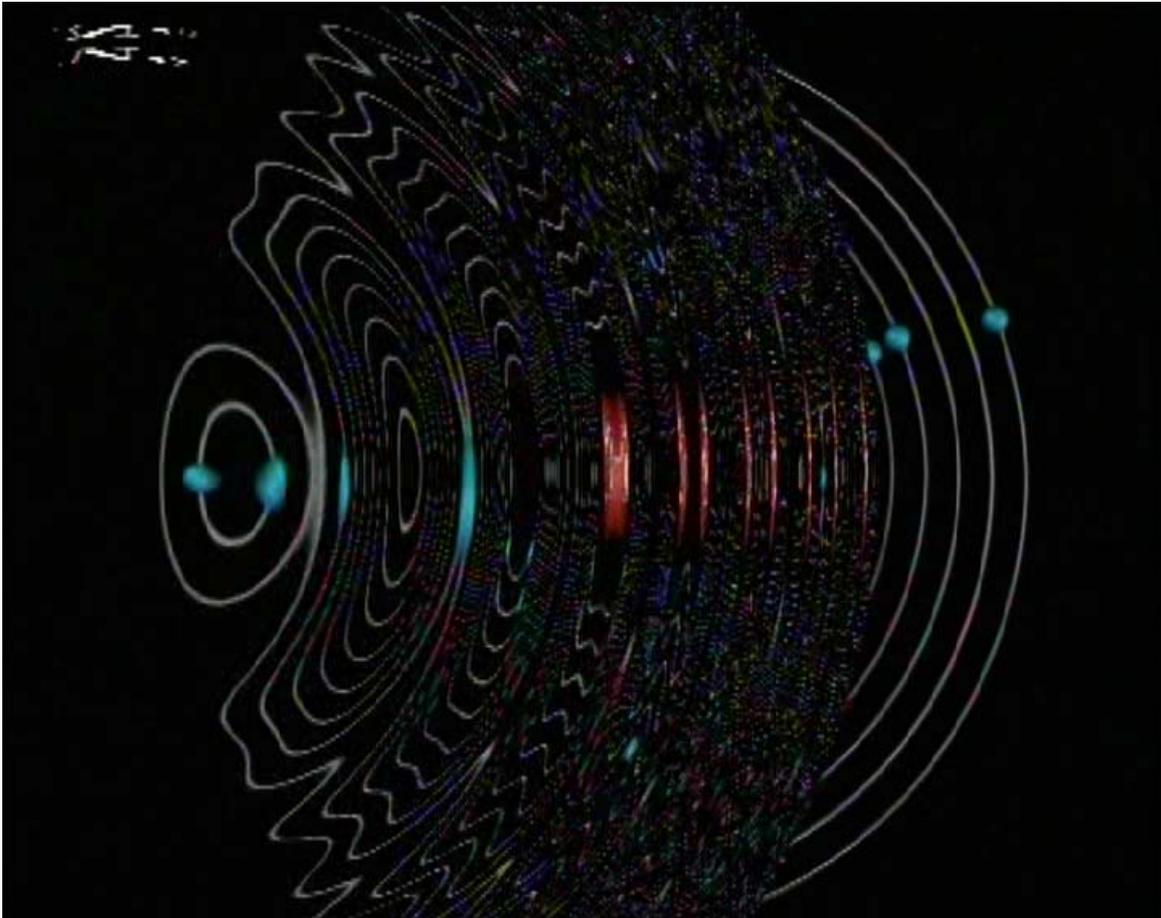


**Quince minutos en la vida del electrón:  
Una mirada en detalle**



**GUÍA DIDÁCTICA**

**Luis M. Sesé Sánchez**

**Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas  
Facultad de Ciencias, UNED**

**Depósito Legal: M – 26352 – 2009  
ISBN: 978 – 84 – 362 – 5635 – 2  
Extensión (2013)**

## **NOTA A LA VERSIÓN EXTENDIDA (2013)**

Pasados unos años desde su publicación inicial (2009), me ha parecido interesante incluir un material complementario a esta Guía que, aunque pensado para entonces, no pudo ser incorporado por diversas razones. Esta extensión contiene un conjunto de notas aclaratorias o de carácter histórico al final de esta Guía, algunas explicaciones extra sobre la función de onda, y otros detalles adicionales. Espero que estas adiciones contribuyan a hacer de esta Guía un mejor medio para introducirse en el estudio de la estructura atómico-molecular.

Madrid, Julio 2013

Luis M. Sesé

## PRÓLOGO

La presente Guía Didáctica acompaña al proyecto educativo multimedia titulado “*QUINCE MINUTOS EN LA VIDA DEL ELECTRÓN: UNA MIRADA EN DETALLE*”, editado por la Universidad Nacional de Educación a Distancia. Este nuevo Proyecto se ha construido sobre la base de un primero, de título más corto “*QUINCE MINUTOS EN LA VIDA DEL ELECTRÓN*” (2001, 2003). Los autores de este primer Proyecto, el realizador del video, José A. Tarazaga, y el guionista abajo firmante, nunca imaginamos la favorable acogida que tanto el alumnado como diversas Instituciones han venido dispensado a aquel trabajo. El video ha recibido dos premios en sendos festivales Internacionales de Cine Científico (Zaragoza, 2001, Ronda 2002) y uno más concedido por la Real Sociedad Española de Física (La Coruña, 2002). También ha sido film invitado a participar en la exhibición internacional de Cine Científico “Vedere la Scienza” (Milán, 2003, 2004), así como ha sido invitado para tomar parte en el Proyecto de Cine Científico CISCI (Milán-Viena), patrocinado por la Comisión Europea (2005). El presente Proyecto intenta responder a las expectativas generadas en tan amplia audiencia ampliando los contenidos en varias formas, documentos escritos, visuales, y radiofónicos.

En esta Guía se desarrollan, dentro de unos límites estimados como razonables, muchos de los conceptos que de manera visual y/o hablada se introducen en las distintas secciones, ligados a los detalles centrales relativos al descubrimiento que marcó una parte importante del rumbo científico y tecnológico del siglo XX: el electrón, sus propiedades, y la creación de la Mecánica Cuántica. No es por casualidad que al siglo XX se le denomina “*el siglo del electrón*”. Todos los documentos contenidos en esta obra forman un complemento a un libro de texto y al trabajo en el laboratorio, que son donde uno, armado de perseverancia y dispuesto a trabajar duro, debe dirigirse cuando quiere aprender de verdad una materia. La intención es que todos ellos puedan ser utilizados como instrumentos didácticos de ayuda, motivadores del estudio, en la búsqueda de que la (cada día más creciente) “energía de activación” del estudiante para emprender esta tarea sea menor. Consecuentemente, en esta Guía se presenta una selección bibliográfica en la que el lector podrá encontrar todas las discusiones pertinentes con mayor profundidad.

Por otra parte, al final de esta Guía se incluye **una serie de actividades recomendadas**. La realización de estas actividades es obligada si se pretende un aprendizaje más eficaz. Por otra parte, es primordial hacer llegar al estudiante la idea de que no todo lo que se ve y oye hay que creerlo sin más. *Siempre hay que comprobar la información recibida* (¡la consulta de otros documentos debe ser siempre saludada y buscada!). En lo que respecta a las imágenes el espectador debe mantener siempre alerta su espíritu crítico y su capacidad de reflexión. De este modo podrá captar con claridad los hechos conceptuales sobre el objeto fundamental de esta obra: el electrón y sus propiedades más fundamentales.

En este sentido, debo de hacer algunas precisiones en cuanto a las imágenes y recreaciones de experimentos en el video. Al ver el video debe tenerse en cuenta el poder de la imagen y su capacidad para *sugerir* ideas que se desarrollan con más profundidad en los documentos escritos que le acompañan. Ha sido pues objetivo principal ilustrar los conceptos haciendo énfasis en la parte pedagógica, lo que ha forzado a exagerar determinados elementos visuales (como el tamaño de las aberturas en el experimento ideal de Feynman y otros), de modo que la idea básica resalte. Igualmente, también se ha procurado ilustrar el concepto presentado con la imagen más llamativa en términos estéticos o más fácilmente identificable (anillos de difracción en vez de las habituales líneas o franjas en el mismo ejemplo de las aberturas), intentando mantener un equilibrio razonable entre el árido rigor científico y la comunicación accesible de conceptos difíciles. Las recreaciones de los experimentos no se corresponden, en general, con los diseños experimentales originales, son de nuevo elementos de apoyo pedagógico. También, en cuanto a algunos símbolos matemáticos que aparecen se ha optado por el uso de la simplificación razonable, al objeto de no hacer excesivamente pesada la presentación para el posible espectador no iniciado en estas materias. Así, se ha usado el mismo símbolo ( $\sim$ ) tanto para describir las situaciones de proporcionalidad entre variables, como para aquéllas que hacen referencia al orden de magnitud de estas en algún caso concreto. En las entrevistas de “A Hombros de Hombres” la información adicional que se introduce superpuesta a las imágenes de los interlocutores es responsabilidad mía, y se presenta una notación decimal internacional, acorde con la habitual en calculadoras y computadores: el punto marca el inicio de los decimales, en lugar de utilizar “la coma” española que aparece en el resto de los documentos. Dado que este material audiovisual se podrá encontrar en

internet, creo que este formato lo hará más accesible para amplias audiencias. Todos estos y otros detalles pueden ser convenientemente tratados y ampliados por un Profesor Tutor que, en su caso, dirigiera una sesión educativa (o varias, dada la densidad de contenidos) sobre el video. En el caso del estudiante que no pueda disponer de tal ayuda o que prefiera el auto-estudio, encontrará las notaciones y expresiones rigurosas dentro de esta Guía.

No puedo terminar este prólogo sin expresar mis agradecimientos. Al realizador José Antonio Tarazaga por su paciencia y empeño en enseñarme lo que es un programa de corte televisivo. Tengo que alabar su versatilidad, imaginación y curiosidad (ya quisiéramos todas estas cualidades muchos científicos) en la búsqueda de imágenes de todo tipo atractivas para ilustrar los conceptos. Por lo que respecta a la Primera Edición tengo que hacer referencia a las siguientes personas. Rosa María Gómez (TVE), que se ocupó del montaje y la postproducción del video (2001), llevando su impecable trabajo mucho más allá de lo que el deber exigía. Sin su dedicación, el video, me atrevo a asegurar, no sería lo que es. A José Tenorio, ayudante de realización, por su trabajo de búsqueda. A Victor Dorado Saucó por la brillante labor de infografía llevada a cabo. A Miguel Ángel Tallante, el compositor de la banda sonora original que realza de modo soberbio cada concepto vertido en el video, y a Isabel Arribas (TVE) por su fino trabajo de sonorización. A TVE por las facilidades dadas para la postproducción completa del video. Al Excmo. Ayuntamiento de Santa María la Real de Nieva (Segovia) por su amabilidad al dejarnos utilizar el Claustro del Monasterio allí sito para las grabaciones de las secuencias en las que me veo directamente implicado. A Paco Chacón, Director de Fotografía, Pedro Mordt, ayudante de cámara, Miguel Ángel Walther, técnico de sonido, y al equipo de iluminación (ENFOCO), todos ellos responsables de que mi aparición en tales secuencias resulte llevadera. A Producción de la Universidad, en las personas de Antonio Fernández-Abellán, Txomin Calvo y Luis Baidés, por hacer posible el desplazamiento al lugar de grabación y por la agradable estancia proporcionada en Segovia. Debo mencionar a Gloria Cámara que puso su sugerente voz a las locuciones originales de la primera edición. Con respecto a la reimpresión que tuvo lugar en 2003 mis más sinceras gracias van a José M. Rupérez (la voz del monje), J. I. Pedroviejo (montaje UNED), Raquel Ortiz (Postproducción UNED), y al Vicerrectorado de Medios por su inestimable ayuda en la tarea de mejorar este producto.

Por último, pero no menos importantes, mis compañeros del Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas de UNED, en especial al Director del Departamento Prof. Arturo Horta, y a los profesores Inés F. Piérola, Lorna Bailey, M. Criado-Sancho, y Fernando Peral.

Por lo que respecta al presente Proyecto multimedia éste comprende las siguientes partes. El video original, la presente Guía Didáctica en versión ampliada de la primitiva, seis programas de radio con la serie titulada “Parque Cuántico”, y la serie de cinco charlas en formato televisivo “A Hombros de Hombres”. Estas nuevas adiciones de material han sido posibles gracias a la colaboración de otro buen número de personas. En primer lugar, es un inmenso placer para mí reconocer el trabajo de mis colegas, invitados para la sección a “Hombros de Hombres”, la Profesora Amalia Williard (UNED), al Doctor Carlos P. Herrero (CSIC-ICMM), al Profesor Fernando Peral (UNED), al Doctor Rafael Ramírez (CSIC-ICMM), y al Profesor Carlos Vega (UCM). Su inestimable colaboración, suministrando los perfiles biográficos “en directo” de personajes centrales, realizada de forma completamente desinteresada, revela un encomiable espíritu de servicio a la tarea de divulgación científica. Como es lógico, toda la responsabilidad del presente material es del autor abajo firmante. No puedo finalizar sin agradecer a los locutores presentadores (UNED) de radio su tarea en la serie Parque Cuántico, José María Rupérez y Juan Ramón Andrés Cabero, y, por supuesto, a mi amigo y realizador favorito, José Antonio Tarazaga, tan alma de este Proyecto como yo mismo. Mil gracias a todos y cada uno de ellos.

Madrid, Septiembre de 2009

Luis M. Sesé

# ÍNDICE

## A MODO DE INTRODUCCIÓN

### A. EVIDENCIAS PRELIMINARES

1. Tubos de descarga y experimentos de Crookes (1878).
2. Los primeros espectros atómicos de Bunsen y Kirchhoff (1859-1863).

### B. DESCUBRIMIENTOS EXPERIMENTALES

3. La medida de la relación masa/carga del electrón por Thomson (1897).
4. El efecto fotoeléctrico y la explicación de Einstein (1905).
5. La medida de la carga del electrón por Millikan (1909-1913).
6. El modelo atómico de Rutherford (1911).
7. El espectro del átomo de hidrógeno.

### C. PRIMERAS TEORÍAS PARA NUEVAS REALIDADES

8. La estabilidad de la materia y el modelo atómico de Bohr (1913).
9. Confirmaciones, mejoras e inadecuación del modelo de Bohr (1914-1916).
10. La luz, una vez más corpúsculo: efecto Compton (1921-1923)
11. La hipótesis de de Broglie (1923) y su confirmación experimental para el electrón (1927).
12. El experimento de las “dos rendijas” con electrones.

### D. LA MECÁNICA CUÁNTICA

13. El nacimiento de la Mecánica Cuántica (1925-1927).
14. Algunos conceptos avanzados: el espín y sus consecuencias.

### E. APÉNDICES

APÉNDICE I. La difusa barrera clásico-cuántica: Interferometría con moléculas complejas.

APÉNDICE II. Premios Nobel citados.

### F. BIBLIOGRAFÍA

### G. CONSTANTES FÍSICAS FUNDAMENTALES Y FACTORES DE CONVERSIÓN

### H. ACTIVIDADES RECOMENDADAS

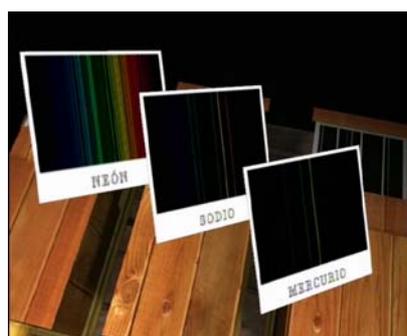
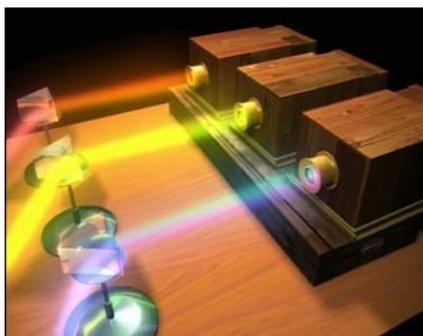
### I. NOTAS A LOS EPÍGRAFES

## A MODO DE INTRODUCCIÓN

Posiblemente, uno de los conceptos clave para el desarrollo, primero científico y posteriormente tecnológico, alcanzado en el siglo XX es el de **electrón**. Esto está relacionado tanto con el hecho de que el electrón fue la primera partícula elemental descubierta, abriendo así el camino a la búsqueda de otras posibles partículas elementales constituyentes de la materia y a la comprensión de ésta, como con la miríada de aplicaciones de índole técnica que nos rodean y que han llegado a formar parte de nuestra vida cotidiana hasta el punto de hacerse indispensables. Piénsese, en este respecto, en la energía eléctrica y su utilización a través de un buen número de aparatos, desde los omnipresentes teléfonos móviles, pasando por la televisión, hasta la batería que nos permite poner en marcha el automóvil en una dura noche de invierno. Pero aún más. Los electrones, componentes básicos de átomos y moléculas, son el “cemento” que mantiene ligados a los núcleos dentro de las moléculas y juegan pues una parte esencial en la producción de reacciones químicas y, por ende, bioquímicas. Así el electrón es obviamente una partícula fundamental de los cuerpos orgánicos dotados de esa cualidad que denominamos vida. En este sentido, la comprensión de la naturaleza del electrón no es solamente la comprensión de una parte del “cómo” del mundo que nos rodea, sino además, aunque a un nivel por el momento muy indeterminado, es entendernos a nosotros mismos. No deja de ser asombroso el hecho de que, aparentemente, los seres humanos estemos dotados de la capacidad para estudiarnos a nosotros mismos, a veces hasta grados insospechados de profundidad.

Aunque no se pueda realizar el cálculo dinámico exacto, es fácil imaginar la trayectoria que, por ejemplo, un móvil clásico (un vehículo, una pelota de fútbol, etc.) seguirá dadas unas ciertas condiciones iniciales. El cálculo matemático aproximado de la trayectoria resulta ser, en la mayor parte de los casos, extraordinariamente próximo a lo que puede observarse. Este determinismo forma el núcleo de la concepción clásica Newtoniana del Universo, que pudo ser disfrutada hasta finales del siglo XIX y que impregnó de una forma substancial las ideas filosóficas imperantes en la época. La potencia de este planteamiento llevó incluso a pensar que nada fundamental en Física quedaba por ser descubierto, que la actividad científica era algo próximo a la frontera de aportar una cifra decimal más al resultado ya conocido, eran momentos en los que la mera mención de cualquier concepto no directamente perceptible por los sentidos, como el de átomo, recibía la más severa y sangrienta crítica por parte de los consagrados

“entendidos” en la materia (es aquí obligado mencionar el triste fin de L. Boltzmann que, enfrentado con los positivistas vieneses, se suicidó en un ataque de depresión). En definitiva, para determinado “establishment” el ideal de la “sublime recapitulación” imperaba. Pero había muchos motivos para que los recalcitrantes conservadores se preocupasen. La fatua estabilidad de su mundo clásico estaba a punto de desmoronarse y, lo peor de todo, ¡sin su permiso!



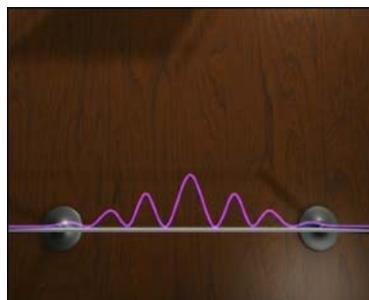
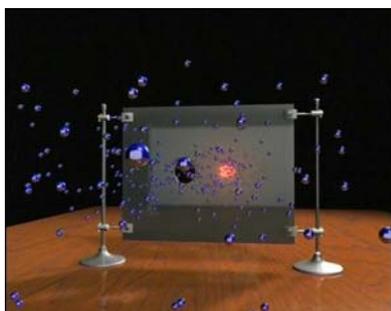
A finales del siglo XIX la evidencia a favor de la existencia de los átomos y moléculas era abrumadora. Toda la experiencia de la Química acumulada y depurada sistemáticamente durante varios siglos, las mediciones electroquímicas, los elementos químicos sistematizados en los primeros intentos de Tabla Periódica, los experimentos con los tubos de descarga conteniendo gases enrarecidos, los espectros atómicos, el descubrimiento de nuevos elementos que resultaron ser sustancias radiactivas, y otras muchas más pruebas, estaban preparando el camino de una nueva revolución científica destinada a entender los fundamentos de la constitución de la materia. La mecánica Newtoniana, pilar del determinismo clásico, iba a dejar de ser aplicable en la escala de dimensiones de los sistemas atómico-moleculares dejando paso a la Mecánica Cuántica como el marco en el que estos sistemas y sus transformaciones deben ser descritos (por otra parte, la Teoría de la Relatividad iba igualmente a conmover los cimientos de la mecánica Newtoniana en otro ámbito, pero esa es otra historia).<sup>1</sup> No podemos pasar por alto que el punto de partida de la Teoría Cuántica vino marcado por el pionero y atrevido trabajo de M. Planck sobre el problema de la radiación del cuerpo negro (1900) y la conclusión de que la energía de la radiación debía necesariamente estar cuantificada (o cuantizada). Esto implicaba que la energía no podía ser una magnitud continua, como en la descripción clásica, sino que debía ir en paquetes o cuantos discretos. La extensión de esta idea de cuantización de la energía de la radiación del cuerpo negro a la luz

(efecto fotoeléctrico, A. Einstein, 1905) y a los calores específicos (A. Einstein 1907, y P. Debye, 1912) suministró un nuevo marco en el que interpretar los fenómenos atómicos. Dentro de este nuevo contexto fue el **electrón** la partícula elemental estrella, la primera descubierta y estudiada exhaustivamente por medio de métodos clásicos, que se mostraba esquiva en determinados experimentos e indicaba la no validez de todas las argumentaciones clásicas y la necesidad de un esquema de pensamiento más amplio que la mecánica de Newton.

Los inicios de la Mecánica Cuántica están así íntimamente ligados a la descripción de la naturaleza del electrón. La descripción del resto de las partículas elementales puede hacerse utilizando los conceptos que el estudio del electrón ayudó a crear. El camino seguido por los hombres de ciencia para crear esta teoría resulta apasionante y pleno de situaciones y fenómenos extraños a nuestra experiencia diaria. El lenguaje que habitualmente utilizamos para describir los fenómenos convencionales no resulta adecuado para describir la realidad cuántica. De forma obligatoria tenemos que renunciar a parte del conocimiento o de los conceptos que clásicamente consideramos válidos cuando nos movemos en este nuevo territorio. Por ejemplo, para los primeros estudiosos clásicos del electrón éste era similar a una bola de billar pero muchísimo más pequeño que ésta. Por tanto, dadas unas condiciones iniciales su *posición e impulso* (el estado clásico) se suponía que podían ser conocidos en todo momento. Sin embargo, y hablando sin mucha precisión para fijar la idea, el estado cuántico del electrón sólo puede ser formulado bien con su posición, bien con su impulso, pero nunca con los dos simultáneamente. Afinemos más: no se pueden medir simultáneamente con toda precisión la posición y la velocidad (ambas con la misma etiqueta de coordenada  $x$ ,  $y$  ó  $z$ ) de un electrón, de acuerdo con lo establecido por el *Principio de Indeterminación*.

Ahora bien, desde los primeros estudios se sabe que el electrón posee carga negativa y masa. Por otra parte, es una partícula que se resiste a ser localizada en el espacio, pues todos los intentos de medir su posición llevan asociados un aumento de su energía cinética, por lo que se “escapa” de la región en la que se encuentra. En el caso de que se le localizara instantáneamente, nada sabríamos sobre su posición e impulso en el instante siguiente. Además, esta partícula posee una propiedad extra como es el espín

que, aunque coloquialmente se asimila a un giro del electrón sobre sí mismo, no es tal cosa. ¿Qué es pues el electrón? ¿Cómo describirlo?



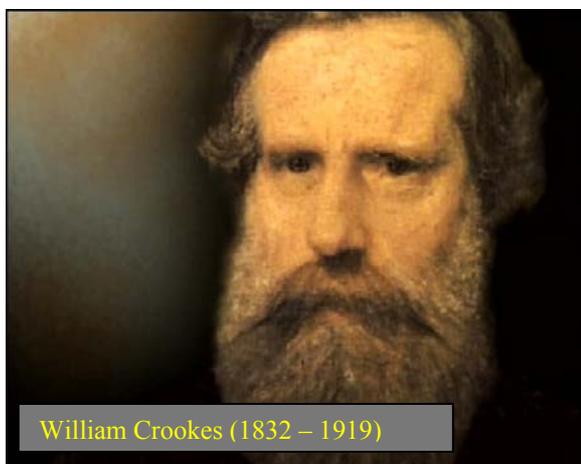
En las primeras versiones de la Mecánica Cuántica un electrón se describía formalmente como una *representación proyectiva irreducible, sobre un espacio de Hilbert, del grupo de Galileo con parámetros característicos (de masa y de espín) dados*. Esta es una definición nada transparente y destinada a los iniciados. Una definición igualmente poco asequible, pero paradójicamente muy sugestiva es la del electrón como una “*torsión negativa de la nada*”.<sup>ii</sup> Como se decía arriba, las dificultades del lenguaje convencional para describir esta realidad a escala subatómica son evidentes en estas dos definiciones. A pesar de ello, la manipulación formal con las herramientas de la Mecánica Cuántica (funciones de onda, matrices densidad, operadores, etc.) ha conducido a una capacidad de predicción de los fenómenos cuánticos en general (no sólo los relativos a los electrones) que hasta la fecha no ha encontrado ninguna contradicción experimental. Las aplicaciones de la Mecánica Cuántica están en la calle y en los laboratorios (chips para computadores, diseño de fármacos, etc.) y todos nos beneficiamos de ellas.

Como de costumbre, todo el entramado que hay detrás de esta gran construcción en el mundo de las ideas no se ve. Este entramado es muy complejo y vasto, y para aproximarnos a él vamos a analizar con algún detalle la historia del descubrimiento del electrón, así como algunas de las propiedades de éste, lo que finalmente llevó al descubrimiento de la Mecánica Cuántica (1925-1926). Dado que por su propia naturaleza esta presentación no puede ser exhaustiva, se va a cubrir la etapa histórica que va desde mediados del siglo XIX hasta aproximadamente 1930, centrando la atención en los hechos experimentales más relevantes, en las teorías pre-cuánticas y apuntando las primeras formulaciones cuánticas. Por razones de completitud se dan igualmente algunas pinceladas sobre los tratamientos y/o problemas planteados dentro

de la Mecánica Cuántica que van más allá de los años 1930. También hay que tener en cuenta que el problema de la constitución de los núcleos atómicos no quedó resuelto hasta el descubrimiento del neutrón en 1932 por J. Chadwick, por lo que toda posible discusión en detalle sobre las masas atómicas queda diferida a futuras ocasiones. Hay, no obstante, dentro de la Galería de Personajes contenidos que, relacionados con éste y otros problemas (el cuerpo negro y Planck, por ejemplo), permiten captar buena parte de su desarrollo y de su resolución. Finalmente, en el Apéndice I, se toma contacto con algunos resultados recientes de la Interferometría de moléculas complejas, por su relación con la de electrones, como herramienta que puede ayudar a decidir dónde se encuentra la difusa línea divisoria entre el mundo clásico y el mundo cuántico.

## A. EVIDENCIAS PRELIMINARES

### 1. Tubos de descarga y experimentos de Crookes (1878)



Las experiencias destinadas a observar el comportamiento de los gases enrarecidos (a baja presión), encerrados en recipientes de vidrio a los que se les aplicaba una diferencia de potencial eléctrico (**tubos de descarga**), eran bastante comunes hacia 1820 y suscitaban un gran interés. Esto se debía a que se observaba conducción de electricidad (un fenómeno ya conocido hacia 1800, por ejemplo, por las pilas voltaicas)<sup>iii</sup> por el medio gaseoso al aplicar grandes voltajes, del orden de miles de voltios. La manifestación visible de esta conducción era la aparición de un haz coloreado, según fuera el gas encerrado (amarillo para el sodio, azulado para el mercurio), que parecía viajar del electrodo negativo (cátodo) al positivo (ánodo), acompañado además de una fluorescencia en el vidrio. Todas estas experiencias habían producido hacia 1860 una cantidad muy grande de información como, por ejemplo, el hecho de que la trayectoria del haz se veía afectada por la presencia de imanes, o que cuanto menor densidad tenía el gas encerrado aumentaba la conductividad. Sin embargo, al no existir una explicación convincente para estos fenómenos, su sentido físico-químico permanecía oscuro para los investigadores de entonces. De hecho, una idea en boga en la escuela alemana era la de que el cátodo emitía un cierto tipo de radiación de naturaleza ondulatoria. El fundamento de esta idea se basaba en los experimentos de J. W. Hittorf (1869) y en otros posteriores realizados por otros investigadores que mostraban la formación de sombras en los tubos al interponer obstáculos entre el cátodo y las paredes de vidrio. Esta radiación catódica suponía

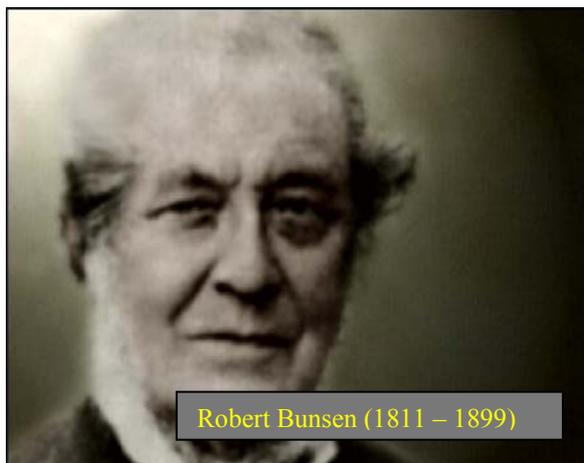
pues que era parecida a la luz y fue así bautizada por E. Goldstein como **rayos catódicos** (1876).

Es en 1878 cuando W. Crookes informa de su meticulosa serie de experimentos, en los que verifica los hallazgos de investigadores anteriores y los extiende. Su estudio de los haces (rayos catódicos) implicó el diseño de unos tubos mucho mejores que los utilizados por sus predecesores. Con ellos comprobó que efectivamente los rayos catódicos se producían en el cátodo y expuso la hipótesis de que la desviación que estos rayos sufrían por el efecto de campos magnéticos externos indicaba que poseían una carga eléctrica negativa. También descubrió el hecho de que los rayos catódicos provocaban *fluorescencia* al incidir sobre determinados materiales, como el sulfuro de zinc, identificando también la “fatiga” de estos materiales (caída de intensidad fluorescente) con el tiempo de exposición. El mismo fenómeno de fatiga fue analizado con detalle por Crookes en las paredes de vidrio de los tubos que sometidos a los rayos catódicos emitían una fluorescencia verde.

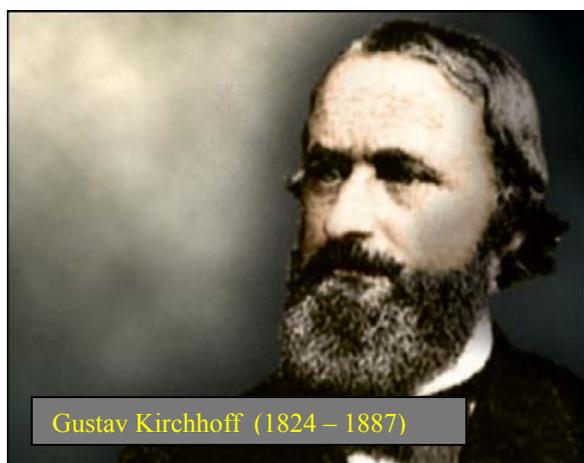
Algunos ensayos adicionales llevaron a Crookes a creer que los rayos catódicos poseían, no sólo carga eléctrica, sino también una masa definida, pero su demostración experimental no resistió un análisis concienzudo como años después probó J. J. Thomson. Es muy posible que esta afortunada idea de Crookes, basada en la interpretación errónea de un experimento, condujera a Thomson a realizar su brillante trabajo sobre la relación masa/carga del electrón (ver más adelante).

Hay que insistir en la controvertida naturaleza de los rayos catódicos. Como se ha indicado arriba la escuela alemana los atribuía a procesos ondulatorios en el **éter**, una substancia imponderable que se pensaba era el medio de propagación de las ondas luminosas y de la que se demostró su inexistencia con los experimentos de A. Michelson y E. Morley (1881- 1887).<sup>iv</sup> Por otra parte, las evidencias obtenidas por Crookes y otros investigadores, como J. P. Perrin (con sus experimentos de bombardeo con rayos catódicos de conductores aislados en los que éstos se cargaban negativamente), apuntaban hacia la naturaleza corpuscular. Tal controversia es, de muchas formas, el eje central del tema objeto de esta pequeña obra.

## 2. Los primeros espectros atómicos de Bunsen y Kirchhoff (1859-1863)



Entre el cúmulo de información obtenida hasta finales del siglo XIX del estudio de los tubos de descarga merece la pena destacar por su trascendencia el análisis del haz coloreado conseguido al hacer pasar la luz que desprendía a través de un prisma de refracción. Esta luz una vez descompuesta se hacía incidir sobre una placa fotográfica. Lo que se observaba sobre la placa no era su velado total sino la impresión de una serie de líneas bien definidas (a longitudes de onda ó frecuencias fijas). Esta serie es característica de cada elemento químico; por decirlo gráficamente, es su “*huella dactilar*”. Al registro (fotográfico) se le denomina **espectro** y es fácil de imaginar la gran utilidad analítica de esta técnica, ya que permite reconocer la presencia de un elemento químico determinado en una muestra arbitraria (por ejemplo, en el análisis bromatológico de alimentos).



Hoy día la sofisticación espectroscópica es muy alta, pero con los rudimentarios medios de primeros del siglo XIX, J. Fraunhofer identificó (1814-1817) las regularidades existentes en el espectro de la luz solar como algo propio de este astro. Años después, R. Bunsen y G. Kirchhoff interpretaron correctamente la naturaleza de estas líneas comparándolas con las que se obtenían *quemando a la llama* elementos químicos y estudiando los espectros de la luz que emitían. Estos científicos descubrieron un buen número de elementos químicos mediante esta “espectroscopia de llama”, por ejemplo: el cesio, con su color predominantemente azul (1860), o el rubidio, con su color rojo oscuro (1861). Otros investigadores tomaron buena nota de este importante avance y también descubrieron nuevos elementos químicos: W. Crookes el talio (1861), F. Reich y H. Richter el indio (1863), etc.

Es muy importante recordar que la naturaleza ondulatoria de la luz era ya un hecho aceptado, de modo que la controversia durante el siglo XVII entre las ideas sobre la luz, de I. Newton como un ente corpuscular y de C. Huygens como un fenómeno ondulatorio, hacía tiempo que había terminado. Incluso la elegante Teoría Electromagnética de Maxwell, que fue desarrollada entre los años 1866 y primeros de los 1870 (publicada en 1873), permitía predecir la existencia de ondas electromagnéticas, cuya confirmación experimental fue obtenida por H. R. Hertz en 1897. De modo que la luz era una onda, o eso se pensaba entonces...

En este momento histórico poco más podía hacerse para comprender la naturaleza de todos los fenómenos que se han comentado. Todos ellos están directamente relacionados con la estructura íntima de la materia y ni los medios experimentales ni las concepciones teóricas estaban en el estadio de desarrollo necesario para acometer esta empresa. Sin embargo, y apoyándose en todo este conocimiento adquirido, los trabajadores de la Ciencia estaban a punto de cambiar la situación.

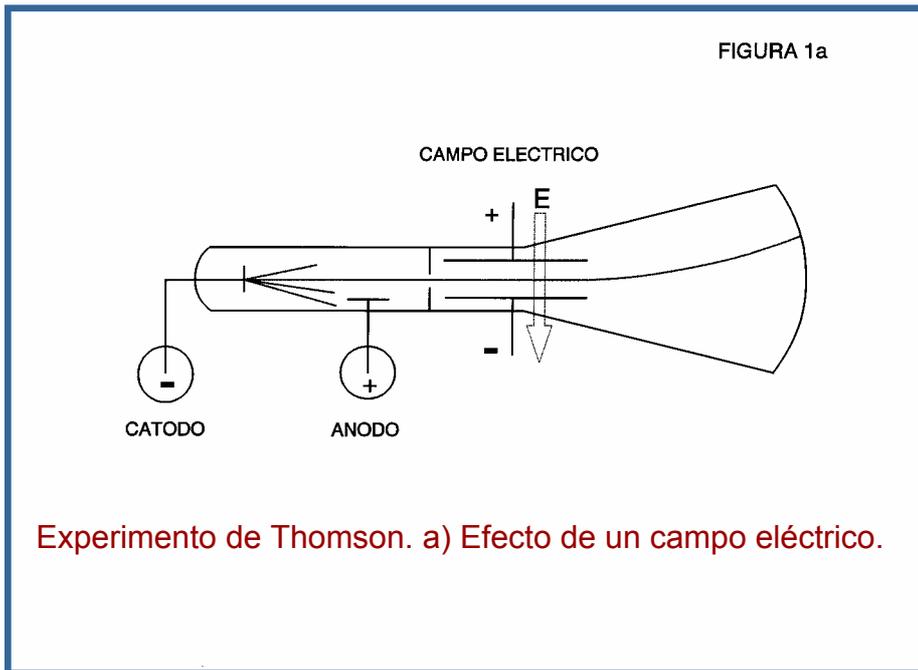
## B. DESCUBRIMIENTOS EXPERIMENTALES

### 3. La medida de la relación masa/carga del electrón por Thomson (1897)

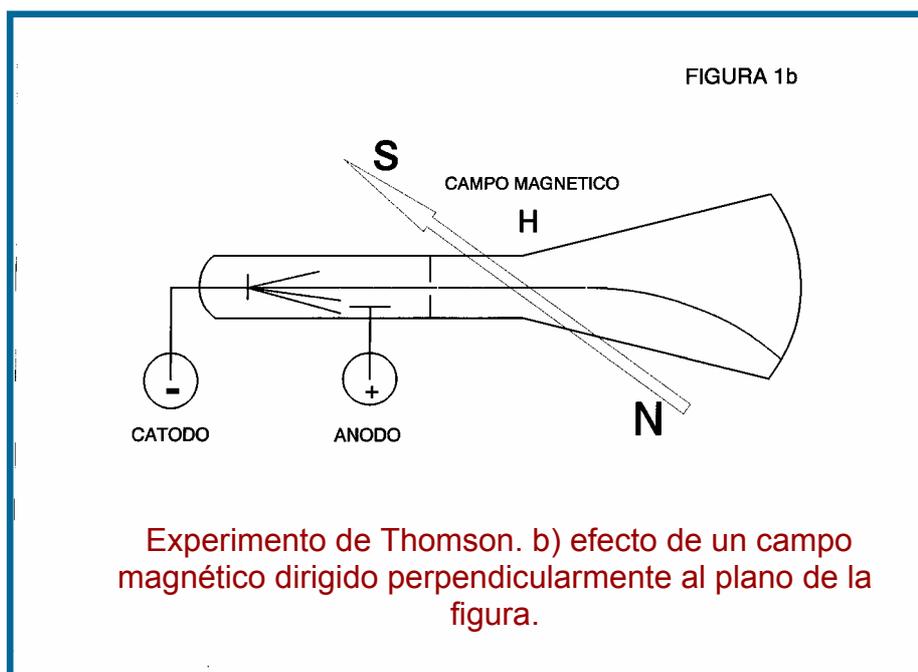


En 1897 J. J. Thomson lleva a cabo una serie de experimentos en el laboratorio Cavendish (Cambridge, Inglaterra) destinados a investigar la naturaleza de los controvertidos rayos catódicos. Para ello utilizó un aparato, modelo tubo de descarga, de la forma indicada en la figuras 1 (a y b). Manteniendo una diferencia de potencial elevada entre los electrodos y dejando el tubo con un alto vacío (aire muy enrarecido) observó algo que otros investigadores, como H. R. Hertz (el descubridor de las ondas de radio), habían pasado por alto: la desviación que los rayos catódicos sufrían por el efecto de campos eléctricos externos (200 voltios y menores). En esta detección fue decisivo el alto vacío logrado, ya que la conductividad del aire contribuía a enmascarar el efecto. Más allá de toda duda esta prueba definía a los rayos catódicos como partículas cargadas negativamente.

La producción del fenómeno es como sigue. Los iones positivos siempre existentes en el aire enrarecido (debidos a la acción de la radiación cósmica u otras causas) se ven acelerados hacia el cátodo cuando se establece el campo eléctrico. Al golpear al cátodo liberan partículas (electrones) del material que se ven aceleradas en sentido contrario, hacia el ánodo. De los choques de estas partículas con las moléculas del gas surgen nuevos iones positivos que mantienen el experimento en funcionamiento.



Para evitar que todas las partículas emitidas desde el cátodo se vean detenidas por el ánodo se le practica a éste una rendija central y a continuación se coloca una pieza metálica con otra rendija, de modo que se disponga de un haz de partículas no detenidas (colimación) que pueda incidir sobre el extremo opuesto del tubo, recubierto de una substancia fosforescente.<sup>v</sup> La zona de impacto sobre este recubrimiento aparece como una señal luminosa brillante (esto es, en esencia, una pantalla de televisión).



Si ahora se establece un campo eléctrico externo vertical dirigido hacia abajo (situando el polo positivo arriba y el negativo abajo) entre dos placas metálicas, se observa cómo el punto de impacto se desplaza verticalmente de acuerdo con una curvatura hacia el polo eléctrico positivo. Este efecto puede deshacerse haciendo actuar un campo magnético perpendicular al campo eléctrico de modo que el polo norte salga hacia fuera del plano del esquema y el polo sur quede detrás (figura 1). Recuérdese que las partículas cargadas describen trayectorias circulares en presencia de campos magnéticos. Un ajuste de las intensidades de ambos campos permite conseguir la situación de impacto sobre la pantalla que se obtenía en ausencia de estos dos campos. De ahí un sencillo cálculo electromagnético conduce a estimar la relación masa/carga para las partículas catódicas. Veamos cómo.

En la situación de impacto “equilibrado” la fuerza eléctrica sobre la partícula catódica coincide con la fuerza magnética experimentada por ésta:

$$q_- E = q_- v B \quad (1)$$

en donde  $q_-$  es la carga eléctrica (negativa) de la partícula,  $v$  su velocidad y  $E$  y  $B$  son, respectivamente, las intensidades de los campos eléctrico y magnético externos aplicados.<sup>vi</sup> El radio de la trayectoria circular seguida por la partícula bajo el efecto del campo magnético viene dado por

$$r = m v / B q_- \quad (2)$$

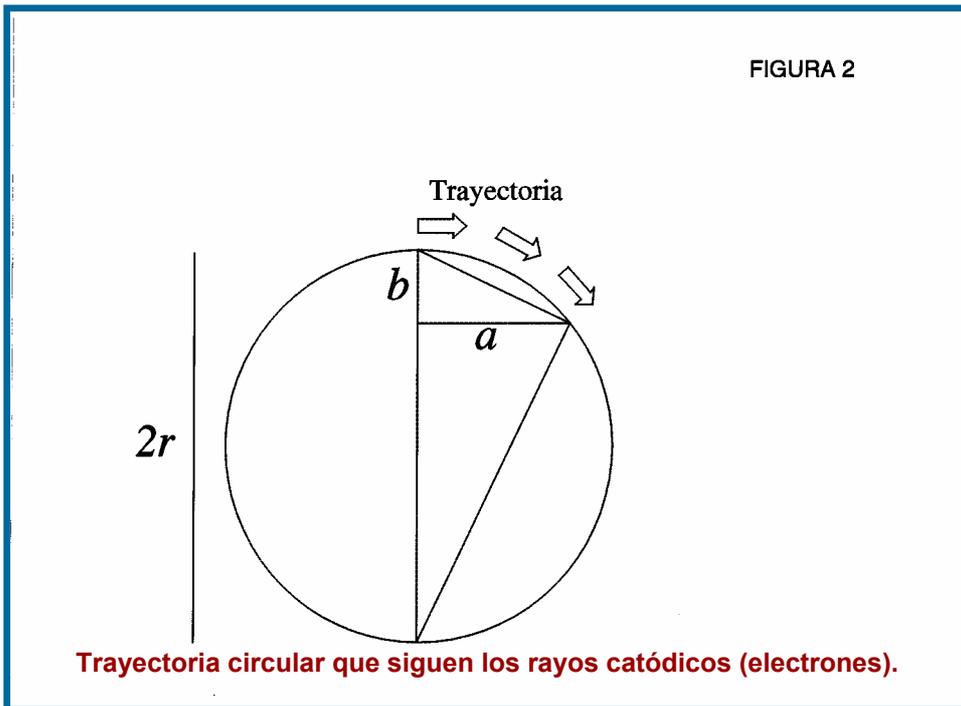
Por tanto, la relación masa/carga de las partículas catódicas es

$$m / q_- = r B^2 / E \quad (3)$$

La magnitud  $r$  puede deducirse del sencillo cálculo geométrico que liga la cuerda, el radio y la altura de un segmento de un círculo (figura 2)

$$2r = (a^2 / b) + b \quad (4)$$

la cual claramente es una cantidad que debe determinarse del experimento.



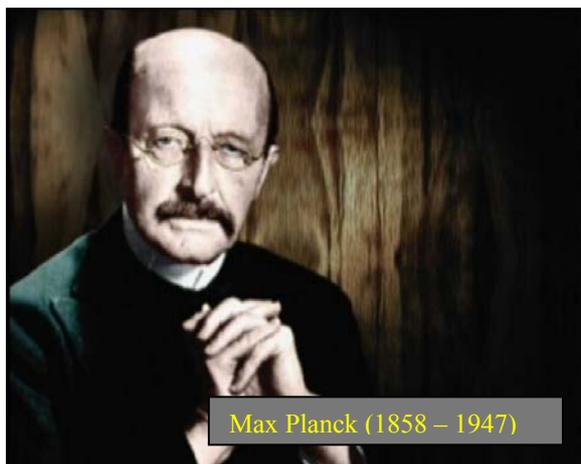
El resultado obtenido por Thomson para la relación que nos ocupa fue de un orden de  $10^{-7}$  uem (unidades electromagnéticas). Este valor equivale a  $10^{-8}$  g/C y en su determinación Thomson comprobó que era independiente del gas contenido en el tubo de experimentos: aire, hidrógeno, y dióxido de carbono (C= coulombio)

El siguiente problema que abordó Thomson (junto con H. Wilson) en 1903 fue el de la determinación independiente de la carga de las partículas catódicas. Su intento (basado en experimentos previos de J.S Townsend) aunque ingenioso no tuvo éxito, pues estaba basado en la velocidad de caída de gotas de vapor de agua ionizada y éstas se evaporaban antes de obtener medidas fiables. De nuevo una buena idea que, aunque de realización fallida, fue recogida por Millikan años más tarde para su brillante determinación de la carga de estas partículas. Hay que decir, finalmente, que las partículas catódicas emitidas desde la superficie de diferentes materiales metálicos mostraron *todas* la misma relación masa/carga, por lo que se pensó acertadamente que estas partículas eran todas del mismo tipo. Esto llevó a reforzar la especulación, que G. Stoney había mantenido años antes (1881-1891), sobre la posible existencia de una unidad elemental de carga eléctrica

#### 4. El efecto fotoeléctrico y la explicación de Einstein (1905)



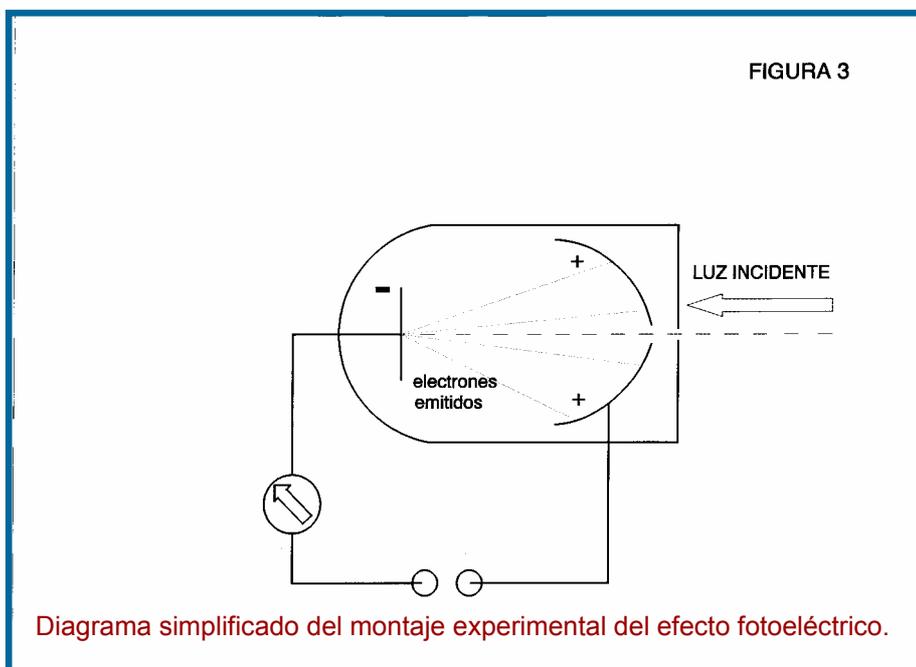
Un hecho descubierto en 1887 por H. R. Hertz fue el que una descarga eléctrica entre dos electrodos se produce con mayor facilidad cuando se hace incidir luz ultravioleta sobre uno de ellos. Esta observación fue completada por P. Lenard en 1902 cuando éste averiguó que en el electrodo iluminado se liberaban partículas que poseían una relación masa/carga idéntica a la fijada por Thomson, denominándose a este efecto *efecto fotoeléctrico*. Estas partículas, catódicas o fotoeléctricas, pasaron a denominarse **electrones** recuperándose el nombre acuñado por G. Stoney en 1891 para la hipotética unidad natural de carga eléctrica.<sup>vii</sup>



En la explicación de este efecto resultó crucial el trabajo de M. Planck sobre la **cuantificación** (coloquialmente cuantización) de la energía en el *interior* de un **cuerpo negro** (una cavidad radiante a una cierta temperatura en la que la radiación alcanza un estado de equilibrio térmico). En este trabajo (1900) Planck introdujo la hoy denominada *constante de Planck*  $h$ ,<sup>viii</sup> que posee dimensiones de **acción**

(energía×tiempo) y que estaba llamada a jugar un papel fundamental en la comprensión de la estructura íntima de la materia. Su valor aceptado hoy es  $h=6.6260755\times 10^{-27}$  erg.s y es de resaltar su pequeñez.

Un esquema del aparato utilizado para poner de manifiesto este efecto es el mostrado en la figura 3. Consta de un recinto de vidrio en la que se ha hecho el vacío y que contiene dos piezas metálicas (electrodos), una de ellas en forma de campana con una abertura en su vértice. Atravesando la ventana de cuarzo que cierra la estructura de vidrio y pasando a través de la abertura en la campana, se hace incidir una luz monocromática (con longitud de onda  $\lambda$  o frecuencia  $\nu$  fijas) sobre la pieza metálica opuesta. Al establecer una diferencia de potencial entre ambos elementos, cuando se utiliza luz ultravioleta (grosso modo con  $90 < \lambda / \text{Å} < 4000$ ), se detecta una corriente eléctrica mediante el amperímetro situado externamente al montaje. Esto se debe a la emisión desde el electrodo iluminado (negativo o cátodo) de partículas cargadas negativamente, **electrones** de aquí en adelante, que se ven atraídas hacia el electrodo positivo (ánodo). Este efecto se observa con mayor facilidad cuando el cátodo está compuesto de metales alcalinos (sodio, potasio, cesio).



Si ahora se modifica la diferencia de potencial entre electrodos, se observa que a medida que aumenta la diferencia de potencial la corriente fotoeléctrica crece hasta

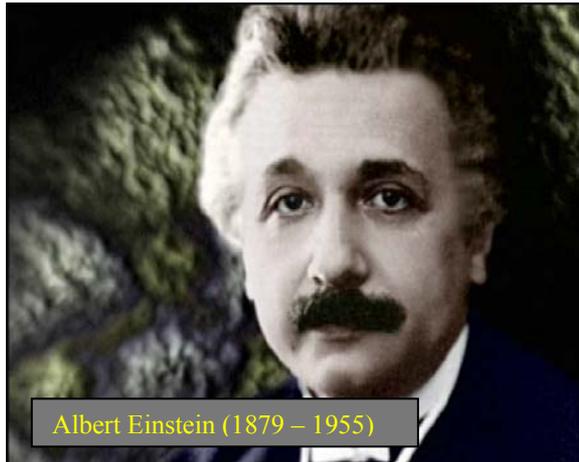
alcanzar un valor límite (saturación), que representa la situación en la que todos los electrones emitidos son captados por la campana positiva.

Cambiando instantáneamente el signo de la diferencia de potencial, es decir introduciendo una fuerza opuesta al movimiento de los electrones, se ve que la intensidad de la corriente fotoeléctrica no se hace cero inmediatamente. Esto significa que, a pesar de la fuerza opuesta, parte de los electrones emitidos siguen la trayectoria original hacia la campana por estar dotados de energía cinética suficiente. Ahora bien, existe un valor (mínimo) más elevado de la diferencia de potencial para el que el frenado de los electrones es completamente efectivo y que hace nula la intensidad de la corriente fotoeléctrica: el *potencial de frenado*  $V_0$ . Este valor multiplicado por la carga del electrón es justamente la energía cinética de los electrones más veloces y resulta además ser independiente de la intensidad de la luz incidente.

La teoría ondulatoria clásica de la luz no da cuenta de este fenómeno por varias razones. Una razón es que al aumentar la intensidad del haz luminoso, la energía cinética de los electrones también debería aumentar y esto está en contradicción con el valor límite constante (para cada material)  $V_0$ . Otra razón es que el fenómeno no ocurre para todas las frecuencias de la luz incidente, sino que existe una *frecuencia umbral*  $\nu_0$  por debajo de la cuál la emisión fotoeléctrica no se produce, algo que es independiente, de nuevo, de la intensidad de iluminación empleada. Nótese que, a partir de tal frecuencia umbral, los aumentos de intensidad en la luz incidente llevan a una mayor emisión de electrones. Además, la teoría clásica no puede explicar la no detección de un período de tiempo necesario para que los electrones acumulen la energía incidente hasta alcanzar un valor que les permita escapar de la superficie metálica (esto debería observarse utilizando luz incidente suficientemente débil).

Consecuentemente y a modo de resumen:

- Existe una frecuencia umbral a partir de la cuál ( $\nu > \nu_0$ ) se observa el efecto.
- La cantidad de electrones emitidos es directamente proporcional a la intensidad de la radiación incidente.
- La energía cinética máxima de los electrones emitidos es directamente proporcional a  $\nu - \nu_0$ , pero no depende de la intensidad de la luz incidente.
- Los electrones se emiten instantáneamente en cuanto la luz adecuada incide sobre el metal, y dejan de ser emitidos en cuanto ésta deja de actuar.



La explicación de A. Einstein dada en 1905 se basa en utilizar la *hipótesis cuántica* de Planck<sup>ix</sup> suponiendo que la luz monocromática incidente de frecuencia  $\nu$  está compuesta por un conjunto finito de paquetes o **cuantos** de energía (posteriormente llamados **fotones**)<sup>x</sup> localizados, independientes e indivisibles. Esta idea de discontinuidad de la energía en la radiación electromagnética se expresa

$$E = h\nu = hc / \lambda \quad (5)$$

en donde  $c$  es la velocidad de la luz de valor  $2.99792458 \times 10^{10} \text{ cm.s}^{-1}$ , y la frecuencia tiene unidades de tiempo<sup>-1</sup> (la longitud de onda  $\lambda$  tiene unidades de longitud). Nótese que la frecuencia puede también expresarse en unidades de (distancia)<sup>-1</sup> utilizando la velocidad de la luz como factor de conversión, por ejemplo

$$\nu'(\text{cm}^{-1}) = \frac{\nu(\text{s}^{-1})}{c(\text{cm.s}^{-1})} \quad (6)$$

La Ec. (6) expresa la frecuencia “*en número de ondas*”.<sup>xi</sup> Al consultar la bibliografía el lector debe estar atento al convenio de símbolos utilizado para denotar las frecuencias.

Con la idea anterior la explicación del efecto fotoeléctrico es simple. Los electrones se encuentran atrapados en el metal por determinadas energías, de modo que los habrá **más ligados** y **menos ligados**. Sea la energía de ligazón de los menos ligados  $\phi_0$  (*función de trabajo*), que es una magnitud típica de cada material (del orden de algunos electronvoltios). Si un electrón absorbe un cuanto  $h\nu$ , esta energía se utiliza en liberar al electrón y en comunicarle energía cinética. Existe por tanto un *umbral de*

energía  $h\nu_0$  para arrancar electrones y la energía cinética máxima comunicada a un electrón de los menos ligados será

$$E_{cin,max} = h\nu - \varphi_0 \quad (7)$$

El resto de los electrones recibirá una energía cinética menor acorde con la mayor ligazón que tenían en el metal.

La confirmación experimental de esta idea de Einstein fue dada por R. Millikan en 1916 al medir mediante el efecto fotoeléctrico la constante de Planck y hallarla coincidente con el primer valor obtenido por éste último. Nótese que la explicación de Einstein vuelve hacia la idea de Newton de la luz como corpúsculo. ¿Qué es la luz pues, onda o corpúsculo?

## 5. La medida de la carga del electrón por Millikan (1909-1913)

Recordemos que Thomson había determinado la relación masa/carga de los electrones, pero que no pudo fijar la carga por separado. Aunque Thomson y Wilson obtuvieron estimaciones para la carga, el vapor de agua ionizado que utilizaron para ello se evaporaba antes de poder obtener mediciones suficientemente precisas para esta magnitud. En este punto, el lector puede argumentar ¿por qué no diseñar un experimento para fijar únicamente la masa? La cuestión es que esta tarea no puede realizarse debido a la naturaleza eléctrica del electrón, que tiene que acelerarse usando campos eléctricos y/o magnéticos, de modo que sus propiedades inerciales se ven entremezcladas con las eléctricas. La carga, sin embargo, sí puede ser fijada de un modo independiente, sin más que suponer que existe un valor mínimo, idéntico para todos los electrones.

R.A. Millikan siguiendo una línea similar a la de sus predecesores, pero introduciendo un método de seguimiento *individual* detallado de las gotas de agua bajo la acción de **campos eléctricos** y el **campo gravitatorio**, tropezó con los mismos problemas de evaporación. En estas circunstancias decidió utilizar gotas de aceite y someterlas al mismo tratamiento. Este experimento, comunicado en 1911, se conoce como *el experimento de la gota de aceite* y en el se estableció claramente que existe una

*unidad fundamental de carga eléctrica*, ayudando así de modo decisivo al incipiente establecimiento de la teoría atómica de la materia.



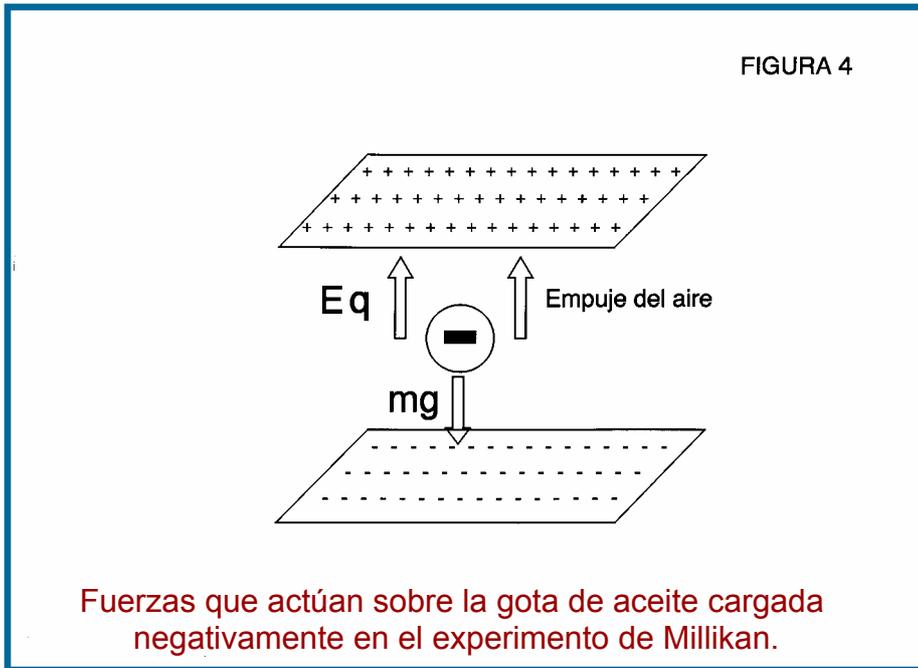
Un esquema del experimento diseñado por Millikan se muestra en la figura 4. Mediante un “atomizador” (pulverizador comercial) se introduce una nube de finas gotas de aceite dentro de una cámara libre de motas de polvo. En el proceso de pulverización, las gotas adquieren una carga eléctrica por efecto del rozamiento. En esta cámara hay dos pesadas placas metálicas (circulares) y paralelas, situadas a 16 mm una de otra y estando ambas conectadas a un generador eléctrico, que inicialmente se mantiene desconectado. La placa superior, conectada al polo positivo, posee una pequeña abertura que algunas gotas de aceite pueden atravesar al caer por efecto de la gravedad, introduciéndose así en el espacio entre placas. La cámara también posee dos ventanas de vidrio opuestas a través de las cuales se hace pasar un estrecho haz de luz procedente de una lámpara eléctrica externa (denominada en el artículo original “lámpara de arco”) de modo que quede entre las dos placas. En una dirección situada a  $165^\circ$  con respecto al haz luminoso incidente la cámara tiene otra ventana, en cuyo exterior se sitúa un anteojo (de foco corto).

El procedimiento es como sigue:

- 1.- Cuando una gota de aceite cae por la abertura y se sitúa en una posición de observación se la puede ver como una “estrella brillante sobre un fondo negro”. Esta gota iluminada cae por efecto de la gravedad hacia la placa inferior (conectada al polo negativo), pero antes de que la alcance se procede a conectar el generador (intensidades de campo eléctrico  $E$  entre 3000-8000 volt/cm).
- 2.- Si la carga adquirida por la gota bajo observación es *negativa*, se verá desplazada hacia arriba en contra de la gravedad. Entonces, y antes de que esta gota se estrelle contra la placa

positiva, se desconecta el generador de modo que la gota vuelve a caer y se mide por el anteojo el tiempo ( $t_1$ ) que tarda en recorrer una distancia fijada, bajo el único efecto de la gravedad.

3.- Se conecta de nuevo el campo eléctrico y se determina la velocidad de subida de la gota, midiendo el tiempo ( $t_2$ ) empleado en recorrer la misma distancia. Las dos velocidades, de bajada ( $v_1$ ) y de subida ( $v_2$ ), son *constantes* debido a la *resistencia del aire* y al pequeño tamaño de la gota.



4.- Admitiendo que las gotas son esféricas y de radio  $a$ , su peso **menos** el empuje del aire viene dado por

$$\text{Peso-empuje del aire} = M^* g = \frac{4}{3} \pi a^3 (\rho - \rho') g \quad (8)$$

en donde  $\rho$  es la densidad del aceite y  $\rho'$  la densidad del aire. Nótese que  $M^*$  no es la masa real de la gota, sino una *masa efectiva* para ésta.

5.- Puesto que la velocidad de la gota en un medio viscoso es proporcional a la fuerza que actúa sobre ella, se puede escribir:

$$\frac{v_1}{v_2} = \frac{M^* g}{Eq - M^* g} \quad (9)$$

donde  $v_1$  es la velocidad de caída bajo la acción solamente de la gravedad (aceleración =  $g$ ),  $v_2$  es la velocidad bajo la influencia conjunta del campo eléctrico y de la gravedad, y  $q$  es la carga adquirida por la gota en la pulverización.

6.- Los radios de las gotas son del orden de  $10^{-5}$  cm, por lo que su determinación directa en aquellos tiempos resultaba imposible. Así, Millikan recurrió a un ingenioso argumento. Se sabe que los cuerpos que caen en un medio viscoso aumentan su velocidad hasta alcanzar un *valor límite* ( $v_1$ ). Este comportamiento viene regulado por la *ley de Stokes* que en el caso que nos ocupa, en ausencia de campo eléctrico, se expresa:

$$\frac{4}{3}\pi a^3(\rho - \rho')g = 6\pi\eta a v_1 \quad (10)$$

siendo  $\eta$  el coeficiente de viscosidad del medio. De esta ecuación puede determinarse el radio  $a$  de la gota estudiada.

7.- Con las ecuaciones (8)-(9)-(10) se obtiene la carga adquirida por la gota:

$$q = \frac{4}{3E}\pi\left(\frac{9\eta}{2}\right)^{3/2} (g(\rho - \rho'))^{-1/2} (v_1 + v_2) v_1^{1/2} \quad (11)$$

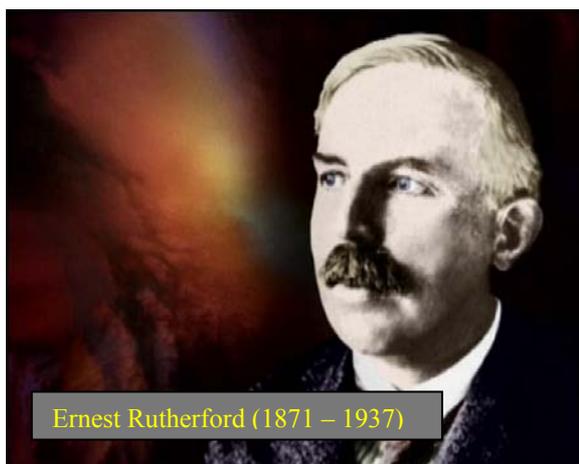
Todas estas mediciones se realizaron sobre la gota seleccionada un gran número de veces, o bien hasta que tal gota capturaba algún ión presente en el aire, lo que se manifestaba por un cambio abrupto en su velocidad (la masa de la gota no se altera apreciablemente por esta captura, pero la carga sí). Todo el experimento anterior se repitió con muchas más gotas y se observó que la carga adquirida por cada una de las gotas era *siempre un múltiplo entero de una determinada cantidad de carga negativa*, que pasó a denotarse con la letra  $e$ .

La percepción de que esta cantidad *mínima e* era la unidad de carga fundamental en la naturaleza era pues muy atrayente (este concepto excluía la existencia de fracciones de esta carga elemental  $e$ ). El valor encontrado por Millikan en su trabajo de 1911 fue  $e=4.93\times 10^{-10}$  uee= $1.645\times 10^{-19}$  C (uee =unidades electrostáticas), resultado que posteriormente se refinó introduciendo pequeñas correcciones en la viscosidad del aire. Asociando este valor a las partículas catódicas (electrones) de Thomson se podía obtener un valor para su masa  $m$ . Toda la evidencia experimental posterior confirmó esta suposición y los valores más precisos para estas dos magnitudes fundamentales y para la relación masa/carga aceptados hoy son los siguientes:

$$\begin{aligned} e &= 1.602177 \times 10^{-19} \text{ C (carga negativa)} \\ m &= 0.910953 \times 10^{-27} \text{ g} \\ m/e &= 0.568572 \times 10^{-8} \text{ g/C} \end{aligned} \quad (12)$$

Es interesante hacer notar aquí que con los valores de la carga y masa que pudieron deducirse de las mediciones de Thomson y Millikan, aplicando la teoría electromagnética,<sup>xii</sup> se realizó una estimación del “radio” del electrón (supuesto esférico)<sup>xiii</sup> que resultó ser  $\cong 1,9 \times 10^{-13}$  cm.

## 6. El modelo atómico de Rutherford (1911)

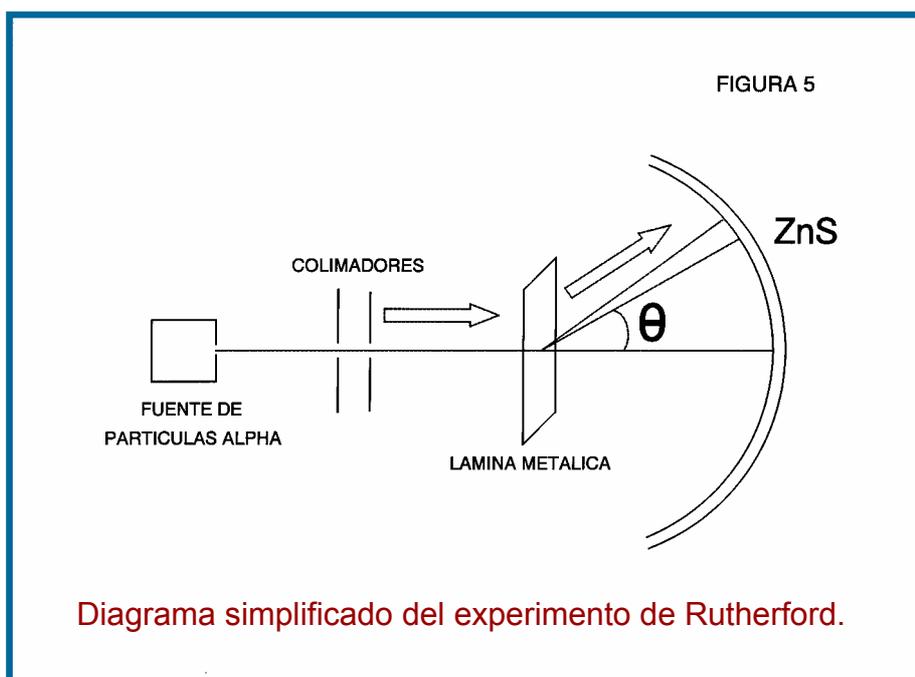


Los científicos más osados de la primera década del siglo XX tenían la casi certeza de que los electrones formaban parte de los átomos.<sup>xiv</sup> Sabían que estos átomos eran entes eléctricamente neutros, tenían un radio del orden de  $10^{-8}$  cm y su masa era de un orden de unas miles de veces mayor que la de un electrón. Por lo tanto, los átomos debían poseer una carga positiva en su interior que compensara la negativa de los electrones. El problema de la distribución de las cargas y las masas dentro del átomo estaba pues servido.

Consecuentemente, un buen número de intentos de modelos atómicos fueron propuestos. J. J. Perrin (1901) propuso un modelo planetario en el que los electrones giraban alrededor de una carga positiva. Thomson (1903) sugirió que el átomo era una distribución esférica continua de carga positiva en la que se encontraban “incrustados” los electrones (el famoso modelo del “pastel de pasas”). Lenard (1903) elaboró su modelo de las “dinamidas”, entes formados por una carga positiva y otra negativa cuyo número era proporcional al peso atómico del elemento, y que además formaban un núcleo impenetrable en el centro del átomo. Otro modelo debido a H. Nagaoka (1904)

abundaba en la idea planetaria suponiendo que los electrones giraban alrededor de un núcleo central todos a la misma distancia y con la misma velocidad angular.

Es en 1911 cuando E. Rutherford, antiguo estudiante de Thomson, emprende su serie de experimentos de bombardeo con **partículas  $\alpha$**  sobre delgadas láminas de oro y de plata. Rutherford ya había descubierto anteriormente que las partículas  $\alpha$  eran átomos de helio doblemente ionizados (sin electrones) que se emitían espontáneamente y con gran velocidad ( $\approx 14.000 \text{ Km.s}^{-1}$ ) en la desintegración de sustancias radiactivas (la radiactividad natural había sido ya descubierta en 1896 por H. Becquerel). Por esta identificación de las partículas alfa se le concedió el Premio Nobel en 1908. El dispositivo experimental de bombardeo que utilizó se esquematiza en la figura 5.



Parte de las partículas  $\alpha$  procedentes de la desintegración del radio se coliman en un haz para hacerlas incidir sobre las láminas metálicas. Las partículas  $\alpha$ , al atravesar las láminas, se ven sometidas a las fuerzas de Coulomb ejercidas por las distribuciones de carga atómicas allí presentes, por lo que al salir de la lámina las partículas  $\alpha$  se ven desviadas de su trayectoria inicial. El haz incidente inicial se dispersa y se recoge sobre una pantalla recubierta de sulfuro de zinc cristalino, sustancia que al recibir un impacto  $\alpha$  desprende un destello luminoso. Un microscopio permite contar los destellos por

unidad de ángulo sólido y con ellos se puede obtener la función de distribución de partículas  $\alpha$  dispersadas. Este tipo de análisis por bombardeo fue utilizado por Rutherford en varias ocasiones y es muy interesante leer en sus artículos el cuidado experimental relativo a la visión de sus colaboradores en estas agotadoras operaciones de conteo. Por otra parte, la formación matemática de Rutherford no era, en absoluto, muy sofisticada y en opinión de muchos autores ésta no pasaba de la de un estudiante de lo que hoy llamamos secundaria. Sin embargo, no cabe ninguna duda de que los conocimientos que tenía le resultaron suficientes para poder dar forma a lo que su poderosa intuición le dictaba sobre la esencia de los fenómenos a los que se enfrentó.<sup>xv</sup>

Los resultados obtenidos en estos experimentos de bombardeo se resumen a continuación:

- a) Más del 99% de las partículas  $\alpha$  atravesaban las láminas sin sufrir una desviación notable (ángulos  $< 3^\circ$ ).
- b) El 0.01% de las partículas  $\alpha$  se veían dispersadas con ángulos  $> 90^\circ$ .
- c) Algunas partículas  $\alpha$  se dispersaban con ángulos cercanos a  $180^\circ$ , es decir rebotaban al alcanzar la lámina y volvían prácticamente en la dirección de incidencia.

Estos resultados no concordaban con los modelos atómicos propuestos hasta entonces, en particular con el de Thomson para el que un ángulo de dispersión menor de  $90^\circ$  era natural, pero de  $180^\circ$  resultaba imposible.

Del análisis anterior surgió la función de distribución experimental de impactos. Este resultado tuvo que ponerse de acuerdo con algún modelo teórico de lo que allí estaba ocurriendo. Para ello y basándose en la evidencia experimental que había obtenido, Rutherford supuso que:

- 1) Toda la carga positiva (y su masa asociada) del átomo se encontraba concentrada en una región que denominó **núcleo**.
- 2) Estos núcleos estarían fijos en las posiciones de la red, no viéndose sus posiciones alteradas por los impactos.
- 3) La dispersión se debía a las interacciones repulsivas de Coulomb entre la partícula  $\alpha$  y los núcleos (el papel de los electrones se consideró despreciable).
- 4) Tanto las partículas  $\alpha$  como los núcleos se comportaban como cargas puntuales, excluyéndose así efectos de penetración en el núcleo por las partículas  $\alpha$ .

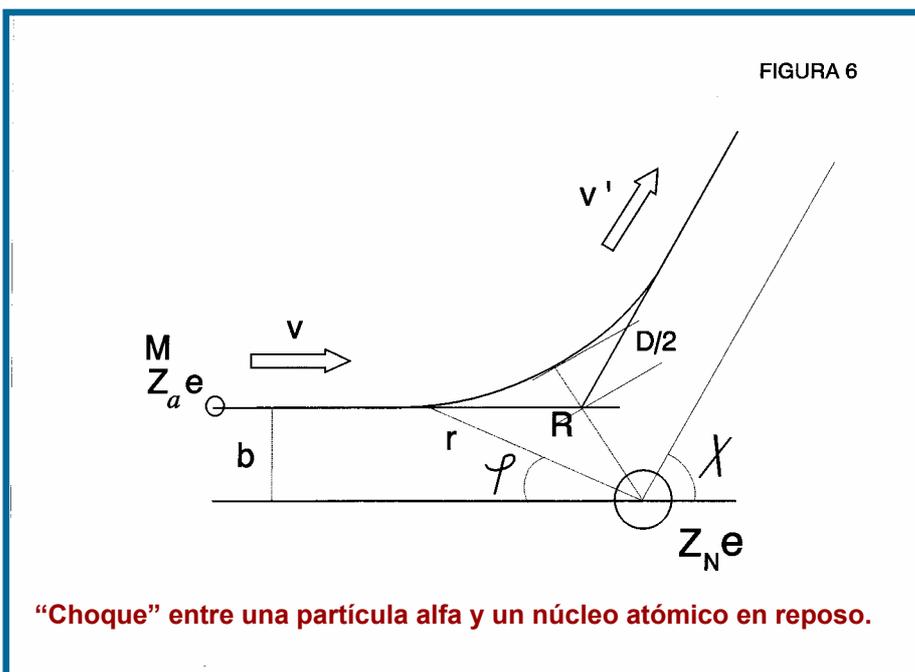
Con las hipótesis anteriores y resolviendo la siguiente ecuación de movimiento clásica

$$\frac{z_\alpha Z_N e^2}{r^2} = M_\alpha \left( \frac{d^2 r}{dt^2} - r \left( \frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right) \quad (13)$$

Rutherford mostró que la trayectoria seguida por una partícula  $\alpha$  dispersada debería ser una hipérbola (figura 6). En (13) las cargas nuclear y de la partícula  $\alpha$  (en unidades de  $e$ ) se denotan por  $Z_N$  y  $z_\alpha$ , habiéndose utilizado el sistema de *unidades electrostáticas* para evaluar la fuerza de Coulomb que, a la distancia  $r$ , actúa sobre el sistema de cargas puntuales  $N$ - $\alpha$  (constante de proporcionalidad  $k=1$ ). La ecuación de la trayectoria hiperbólica de  $\alpha$  en coordenadas polares  $(r, \varphi)$  con el origen de coordenadas en el núcleo es

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{b} \operatorname{sen} \varphi + \frac{D}{2b^2} (\cos \varphi - 1) \quad (14)$$

en donde  $D$  es la distancia de máximo acercamiento al núcleo en una colisión frontal ( $b=0$ ), siendo por tanto este el punto en el que la energía cinética de la partícula  $\alpha$  coincide con la repulsión electrostática (punto de retroceso), y  $b$  es el parámetro de impacto de la colisión. En la figura 6  $\chi$  es el ángulo de dispersión (ángulo entre la dirección de incidencia y la dirección de salida  $\chi = \pi - 2\varphi_R$ ) y se corresponde con el ángulo polar comprendido entre  $0 \leq \chi \leq \pi$  en coordenadas polares esféricas. Se supone simetría de revolución alrededor del eje que contiene al núcleo, por lo que la intervención del segundo ángulo polar  $0 \leq \phi < 2\pi$  será en la forma de un factor integrado  $2\pi$ .



El parámetro  $D$  viene dado por la relación

$$D = \frac{2z_{\alpha}Z_N e^2}{M_{\alpha}v^2} \quad (15)$$

y está relacionado con el ángulo de dispersión por

$$\text{tg}(\chi/2) = D/2b \quad (16)$$

Esta última relación pone de manifiesto que la determinación de la función de distribución angular para las partículas  $\alpha$  dispersadas es equivalente a la de obtener la función de distribución de partículas que inciden con parámetro de impacto dado. Esto significa que el número de partículas  $\alpha$  dispersadas entre  $\chi$  y  $\chi + d\chi$  es igual al de las que inciden con parámetros de impacto entre  $b$  y  $b + db$

$$n(\chi)d\chi = T f(b)db = \text{número de partículas entre } b \text{ y } b + db = \dots \quad (17)$$

en donde  $T$  representa al total de partículas  $\alpha$  incidentes y  $f(b)$  es la *función de distribución de probabilidades* del fenómeno. Notemos las diferentes normalizaciones:

$$\int_0^{\pi} n(\chi)d\chi = T \quad (18)$$

$$\int_0^{\infty} f(b)db = 1 \quad (19)$$

Para una lámina de espesor  $l$  y densidad atómica  $\rho$  la probabilidad de que una partícula  $\alpha$  incida dentro del intervalo  $(b, b + db)$  es haciendo uso de (16)

$$f(b)db = \rho l 2\pi b db = -(\pi/8)\rho l D^2 \frac{\text{sen } \chi d\chi}{\text{sen}^4(\chi/2)} \quad (20)$$

Por tanto, la magnitud experimental a medir se obtiene de este modelo como

$$n(\chi)d\chi = -T f(b)db \quad (21)$$

habiéndose introducido un signo menos para dar cuenta de que a mayores parámetros de impacto  $b$  los ángulos de dispersión  $\chi$  decrecen.

Las ecuaciones básicas de Rutherford (20)-(21) fueron comparadas con el experimento de varias formas y se encontró una buena concordancia. De hecho, salvo para el caso de dispersión por átomos ligeros, las suposiciones del modelo de dispersión de Rutherford son satisfactorias. En las comparaciones que involucran átomos ligeros deben introducirse factores de corrección que tengan en cuenta el valor finito de la masa de los núcleos, frente a la hipótesis de masa “infinita” hecha para los núcleos de elementos pesados. De este modelo se pudo también obtener una estimación del tamaño de los núcleos analizando las distancias de máximo acercamiento (relacionadas con  $D$ ) junto con las estimaciones teóricas del modelo y las observaciones experimentales. Una de las hipótesis del modelo era la *no penetrabilidad* de las partículas en los núcleos (fenómeno que estará relacionado con la energía cinética que aquéllas traigan), de modo que las discrepancias con las predicciones del modelo de Rutherford, corregido con masa de núcleos finita, podrían llevar a una estimación del tamaño de los núcleos. Para obtenerla se utilizaron partículas incidentes con distintas energías y se representó el cociente  $n(\chi) - \text{observado} / n(\chi) - \text{teórico}$  frente a la distancia de máxima aproximación, fijando un valor grande del ángulo de dispersión. La aparición de valores del cociente anterior diferentes de la unidad definía el tamaño límite buscado  $\approx 10^{-12} \text{ cm}$ .

El resultado de Rutherford se expresa modernamente en términos de una cantidad denominada *sección transversal diferencial de dispersión* (o *sección eficaz*)

$$dn = \frac{d\sigma}{d\Omega} Ts d\Omega ; \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{z_\alpha Z_N e^2}{2M_\alpha v^2} \right)^2 \left( \text{sen}^4(\chi/2) \right)^{-1} \quad (22)$$

en donde  $d\Omega$  es el elemento de ángulo sólido ( $= 2\pi \text{sen } \chi d\chi$ ) y  $s$  es la densidad superficial atómica de la lámina.

En resumen, el modelo atómico de Rutherford consistió en proponer que el átomo estaba constituido por un núcleo, portador de la carga positiva  $Z_N |e|$  y de la práctica totalidad de la masa, rodeado por un número  $Z_N$  de electrones que orbitaban a su alrededor, al modo de los planetas alrededor del Sol. Comparando los órdenes de

magnitud del tamaño del átomo ( $\approx 10^{-8} \text{ cm}$ ) y del tamaño del núcleo ( $\approx 10^{-12} \text{ cm}$ ) la conclusión obvia fue que los átomos tenían un “gran espacio vacío en su interior”.<sup>xvi</sup>

Por razones de completitud, y dando un salto en el tiempo, conviene señalar que no acabaron aquí los experimentos de Rutherford bombardeando átomos con partículas procedentes de la desintegración de elementos radiactivos. Estudiando el efecto del bombardeo con partículas  $\alpha$  sobre diferentes gases, Rutherford estableció que los núcleos también tenían una estructura interna (1919) al producir la primera transmutación artificial de elementos (nitrógeno  $\rightarrow$  oxígeno). Unos años después junto con J. Chadwick estableció definitivamente que del bombardeo con partículas  $\alpha$  sobre diferentes elementos químicos (como el boro, el potasio, y otros) se producían protones, actividad que condujo finalmente a la elucidación de la estructura de los núcleos atómicos.

## 7. El espectro del átomo de hidrógeno.

Por razones que van a quedar claras en la sección siguiente, conviene en este punto considerar con más detalle los hallazgos experimentales en el terreno de la espectroscopía atómica, concretamente los relacionados con el átomo de hidrógeno. La producción de este elemento se realizaba en los consabidos tubos de descarga introduciendo gas de hidrógeno molecular  $\text{H}_2$  (ver la sec. 9 para la explicación de la disociación molecular). Una vez rotas las moléculas, los átomos de hidrógeno libres sufrían el bombardeo de los rayos catódicos y de ahí se determinaba su espectro atómico.

Ya en 1885 J. Balmer encontró una relación matemática empírica para las longitudes de onda  $\lambda$  del espectro de **emisión** del hidrógeno atómico en la región visible-ultravioleta cercano (figura 7):

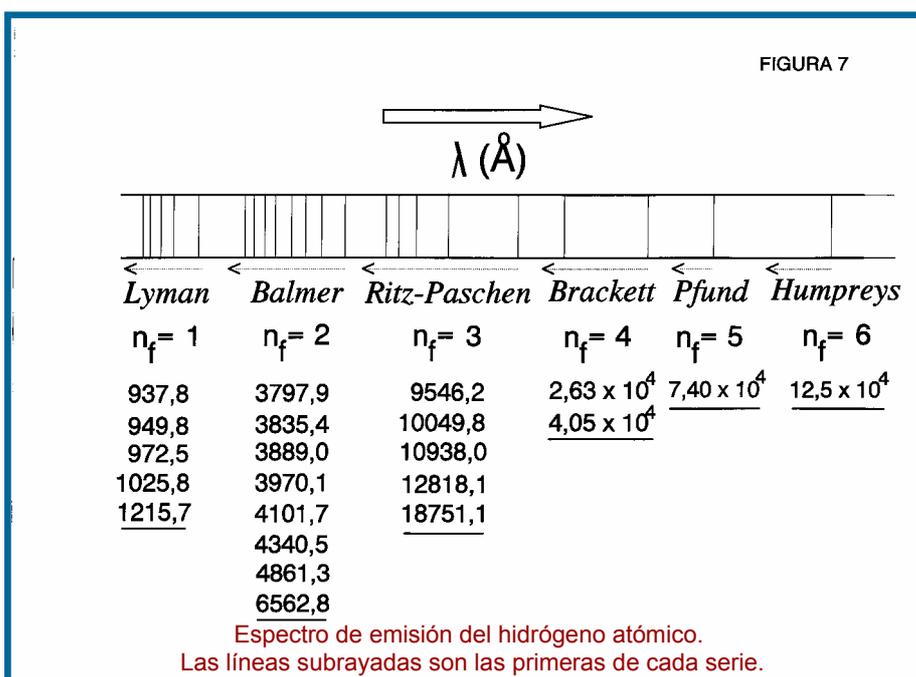
$$\lambda = b \left( \frac{n^2}{n^2 - 4} \right) \quad ; \quad n = 3, 4, 5, \dots \quad (23)$$

siendo la constante empírica  $b=3645,6 \text{ \AA}$ . Igualmente, Balmer señaló en su artículo una moderada sorpresa por el hecho de que en el espectro conocido entonces no aparecieran líneas a las longitudes de onda que se determinarían con su fórmula reemplazando 4 ( $=2^2$ ) por 1,  $3^2$ ,  $4^2$ , etc. Con el paso del tiempo fueron descubriéndose más líneas que rellenaban estas ausencias anticipadas por Balmer y en 1890 una relación más completa que daba cuenta de todas ellas, agrupadas en **series**, fue propuesta por Rydberg:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (24)$$

en donde  $n_f$  es un valor entero fijo para cada serie,  $n_i$  es otro número entero que indica el orden de cada línea en la serie ( $n_i$  empieza en  $n_f + 1$ ), y  $R_H$  es la denominada constante de Rydberg para el átomo de hidrógeno, cuyo valor aceptado hoy es

$$R_H = 109677,581 \text{ cm}^{-1} \quad (25)$$



Todas estas series tienen el nombre del descubridor (o descubridores) de sus líneas:

- Lyman (1916):  $n_f = 1$ ;  $n_i = 2, 3, 4, 5, \dots$  (ultravioleta lejano –de vacío–)
- Balmer (1885):<sup>xvii</sup>  $n_f = 2$ ;  $n_i = 3, 4, 5, 6, \dots$  (visible-ultravioleta cercano)
- Paschen-Ritz (1908):  $n_f = 3$ ;  $n_i = 4, 5, 6, 7, \dots$  (infrarrojo próximo)

- Brackett (1922):  $n_f=4; n_i=5,6,7,8,\dots$  (infrarrojo medio)
- Pfund (1927):  $n_f=5; n_i=6,7,8,9,\dots$  (infrarrojo medio)
- Humphreys (1952):  $n_f=6; n_i=7,8,9,10,\dots$  (infrarrojo medio)

Es interesante notar que:

- i) Todas las series tienen un límite ( $n_i \rightarrow \infty$ ) y a medida que se tiende a éste un número infinito de líneas más y más próximas se presentan.
- ii) Una línea dada es una diferencia entre dos **términos espectrales**, cada uno de ellos definido por una expresión del tipo  $R_H / n^2$ . En virtud de las relaciones (5) y (6), estos términos pueden interpretarse como *términos energéticos*.
- iii) Las series señaladas son de **emisión**, pero si se invierte el orden de los números  $n_f$  y  $n_i$  se obtienen series de **absorción**.
- iv) Con las anteriores convenciones, una línea de emisión  $n_i \rightarrow n_f$  puede interpretarse como una **transición** (o salto) que el átomo realiza desde un nivel energético superior  $n_i$  hasta el nivel energético inferior  $n_f$  y lo análogo, pero al inverso, puede decirse para una línea de absorción.

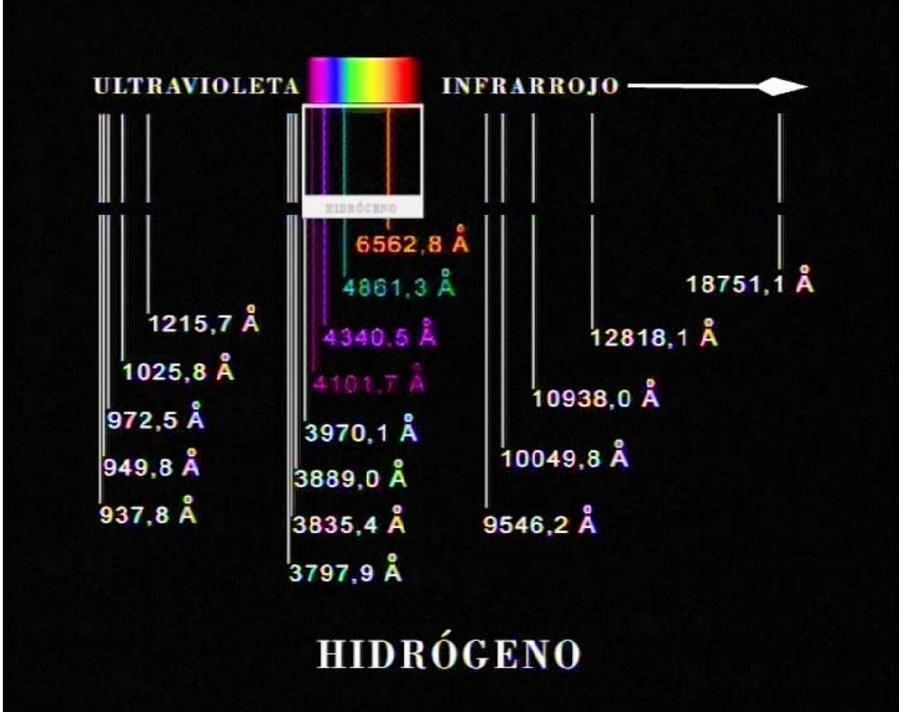
Al igual que una línea espectral puede representarse por la diferencia entre dos términos espectrales, en el hidrógeno la diferencia entre dos términos espectrales (series de Balmer y Lyman conocidas) tenía su representación en una línea del espectro. Para elementos diferentes del hidrógeno W. Ritz observó que relaciones análogas a (21), aunque más complicadas, también eran posibles. Esto llevó a la formulación del *principio de combinación* de Rydberg-Ritz (1908) que suponía la validez general de las dos condiciones anteriores: una línea espectral se corresponde con la diferencia entre dos términos espectrales y, además, la diferencia entre dos términos cualesquiera da una línea del espectro. No obstante, así como la primera parte del principio es siempre cierta para cualquier átomo, la segunda parte presenta **excepciones** al existir *líneas prohibidas*. En el estudio moderno de la espectroscopía estas prohibiciones están recogidas en las denominadas **reglas de selección** que, basadas en argumentos de *simetría*, determinan las líneas *permitidas* y *prohibidas* (=con muy pequeña probabilidad) en un espectro.

Este *principio de combinación* dio una perspectiva muy amplia en el estudio de los espectros atómicos y sirvió como una referencia fundamental para el desarrollo de la Mecánica Cuántica. Más concretamente, como la evidencia experimental apuntaba a que los responsables de las líneas espectrales eran los electrones del átomo (experimentos con gases parcialmente ionizados, etc.), la idea de que los **términos**

**espectrales**, aunque describían niveles energéticos del átomo, estaban asociados a los posibles **niveles energéticos** de los electrones fue gradualmente imponiéndose, facilitando la formulación del modelo atómico de Bohr.<sup>xviii</sup>

Es interesante notar aquí que en el caso del átomo de hidrógeno, en ausencia de campos externos, debería cumplirse el principio de combinación completo. Sin embargo, la observación de los espectros de absorción presenta algunos problemas derivados de la población atómica de los **niveles energéticos** (**términos** en el lenguaje espectroscópico). Para evitar la mezcla indeseada con la emisión concomitante, la situación normal consiste en tener a los átomos en el término de energía más bajo posible  $n = 1$  (**fundamental**), después excitar la muestra y registrar las longitudes de onda absorbidas. Notemos que un único átomo daría una contribución despreciable a la intensidad de la línea espectral, por lo que para que la señal se pueda observar con facilidad la muestra gaseosa debe contener muchos átomos. Todo ello se cuantifica con la **intensidad** de cada línea, que resulta ser tanto mayor cuantos más átomos estén implicados en su producción. En el caso del átomo de hidrógeno se ha detectado en ciertos espectros estelares la serie de Balmer de absorción, cuyo origen está en la elevada **población** atómica del primer término excitado  $n = 2$  forzada por la elevada temperatura de la atmósfera estelar.

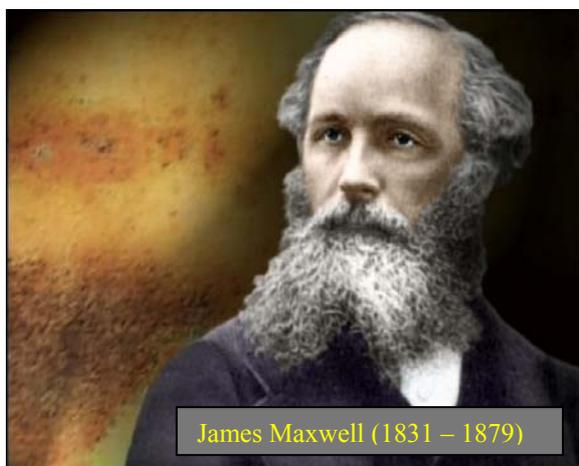
Por lo que respecta a los espectros del átomo de hidrógeno no podemos dejar de mencionar el efecto Stark. Este efecto fue por primera vez descubierto por J. Stark en 1913 utilizando los átomos de hidrógeno producidos en un tubo de descarga y consiste en el desdoblamiento de las líneas espectrales por efecto de un campo eléctrico. Para ello Stark tuvo que emplear campos eléctricos muy intensos (100.000 volt./cm.) que actuasen sobre distancias muy pequeñas (del orden del mm.), una gran dificultad experimental contra la que habían fracasado otros investigadores del momento. Sus observaciones se concentraron en la serie de Balmer. Naturalmente este tipo de efecto no es privativo del hidrógeno, sino que puede observarse en los demás átomos. Un efecto similar, aunque muy diferente cuantitativamente, es el denominado efecto Zeeman, en el que se hace uso de campos magnéticos y que será tratado más adelante.



## C. PRIMERAS TEORÍAS PARA NUEVAS REALIDADES

### 8. La estabilidad de la materia y el modelo atómico de Bohr (1913)

La descripción planetaria de Rutherford para los átomos, aunque filosóficamente atractiva, distaba mucho de responder a toda la realidad experimental conocida. Si bien la identificación del núcleo central positivo era acertada, la distribución planetaria de los electrones planteaba una serie de problemas insolubles dentro del marco de la Electrodinámica Clásica. Si los electrones estaban orbitando alrededor del núcleo, ¿cómo eran sus trayectorias? Por otra parte, siendo los electrones cargas en movimiento acelerado (las trayectorias circulares o elípticas implican al menos *aceleración central*), la teoría clásica, ya desarrollada por J. C. Maxwell (1873), exigía que éstos emitieran radiación, con la consiguiente pérdida de energía que haría que los electrones se precipitaran hacia el núcleo. El resultado es un modelo *inestable* del átomo y por tanto de la **materia**. Para concretar, considérese el caso del átomo de hidrógeno que se discutirá a continuación.



El átomo de hidrógeno sólo posee un electrón que para estar *ligado* y describir una *trayectoria elíptica clásica* con un foco en el núcleo debe tener una energía negativa  $E$ . La frecuencia del movimiento de este electrón depende de las características del sistema electrón-núcleo y viene dada por:

$$\nu = \left( \frac{2|E^3|}{\mu\pi^2 e^4} \right)^{1/2} \quad (26)$$

en donde  $\mu$  es la masa reducida de las dos partículas

$$\mu = \frac{mM_{\text{núcl.H}}}{m + M_{\text{núcl.H}}} \quad (27)$$

Al estar en movimiento acelerado el electrón emitiría, según la teoría clásica, radiación monocromática de frecuencia  $\nu$  (o a uno de sus armónicos). Además, al disminuir el tamaño de la órbita la frecuencia debería ir decreciendo constantemente. De esta manera, el electrón al perder energía caería hacia el núcleo en un tiempo **inferior a**  $10^{-10}s$ , originándose una *emisión continua* de radiación. Sin embargo, tras excitar al átomo de hidrógeno (arco eléctrico, iluminación con radiación electromagnética, etc.) *no se observa* un **espectro** continuo, sino una serie de líneas a frecuencias (o longitudes de onda) definidas: el **espectro** del átomo de hidrógeno que, en parte, ya había sido obtenido anteriormente al modelo de Rutherford y que respondía a la fórmula de Rydberg.



Es N. Bohr en 1913 quien, utilizando la *hipótesis cuántica de Planck* pero aplicada al **momento angular** del electrón, da una explicación del **espectro** conocido por entonces del hidrógeno y del *principio de combinación*. Este modelo atómico para la estructura electrónica se resumía en las siguientes hipótesis:<sup>xix</sup>

- i) Un átomo posee un conjunto discreto de **estados estacionarios** con energías  $E_n$  ( $n=1,2,3,\dots$ ).
- ii) La emisión o absorción de radiación sólo ocurren cuando el átomo pasa de un **estado estacionario** a otro  $E_1 \rightarrow E_2$  (emisión  $E_1 > E_2$ ; absorción

$E_1 < E_2$ ), de modo que la frecuencia  $\nu$  ( $s^{-1}$ ) de emisión o absorción viene dada por

$$\nu(s^{-1}) = \frac{|E_1 - E_2|}{h} \quad (28)$$

- iii) Un electrón en un **estado estacionario** sigue una trayectoria circular clásica en la que no pierde (ni absorbe) energía como resultado de su movimiento.
- iv) Estas órbitas **estacionarias** se caracterizan por tener “**cuantificado**” el módulo  $L$  del momento angular orbital  $\mathbf{L}$  del electrón, de modo que sea un múltiplo entero de la constante de Planck dividida por  $2\pi$

$$L = mvr = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad n=1,2,3,4,\dots \quad (29)$$

en donde  $m$  es la masa del electrón,  $v$  su velocidad orbital,  $r$  el radio de la órbita y  $n$  el denominado **número cuántico principal**.

La condición iv) era suficiente para definir el tamaño, la velocidad y la energía asociadas con las órbitas circulares. Para el electrón del átomo de hidrógeno estas órbitas deberían cumplir la condición de equilibrio entre la atracción eléctrica por el núcleo y la fuerza centrífuga:

$$\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (30)$$

siendo la energía total del átomo la suma de la energía cinética más la energía potencial del electrón en la órbita:

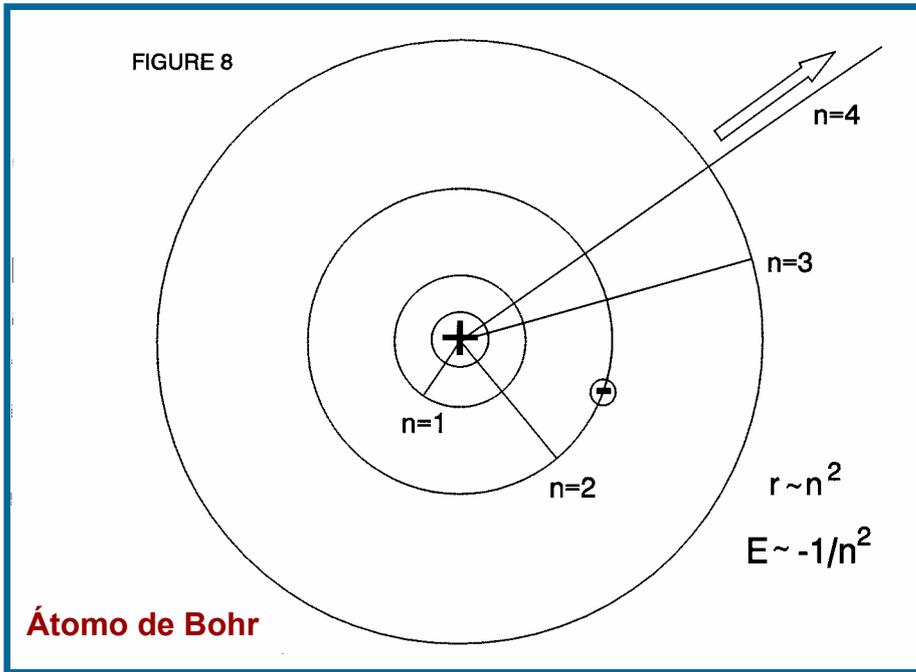
$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r} \quad (31)$$

Utilizando (29) es inmediato obtener los posibles *valores discretos* para las magnitudes relativas al electrón dentro de este modelo ( $n=1,2,3,4,\dots$ ):

$$E_n = - \frac{2\pi^2 me^4}{h^2} \frac{1}{n^2} \quad (32)$$

$$r_n = \frac{h^2}{4\pi^2 me^2} n^2 \quad (33)$$

$$v_n = \frac{2\pi e^2}{nh} \quad (34)$$



Como se ve, sólo son posibles *determinados* valores para la energía, tamaño y velocidad del electrón en las órbitas estacionarias de Bohr, en contra de la imagen clásica en la que todos los valores eran posibles (*continuo clásico*). Es interesante resaltar la diferente proporcionalidad de la energía y el radio de las órbitas con el cuadrado del número cuántico, resultando que las órbitas más alejadas y con mayor radio poseen mayor energía (menos negativa). La órbita  $n=1$  es la más estable (energía negativa más baja) y la más próxima al núcleo (figura 8) y es una representación **del estado electrónico fundamental** del átomo. Las órbitas con  $n>1$  representan a los **estados electrónicos excitados**. El paso siguiente es justificar la fórmula de Rydberg (24) utilizando (32) y la hipótesis ii):

$$v'(cm^{-1}) = (E_2 - E_1) / hc = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3 c} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (35)$$

de donde la identificación de la constante de Rydberg para el átomo de hidrógeno es inmediata:

$$R_H \cong \frac{2\pi^2 m e^4}{h^3 c} = R_\infty \quad (36)$$

Este cálculo teórico de la constante  $R_H$  estaba en muy buen acuerdo con las medidas experimentales obtenidas a partir de la serie de Balmer, dentro de la precisión con que se conocían las diferentes magnitudes en aquella época. La fórmula (35) permitió explicar no sólo la serie de Balmer, sino predecir otras series del hidrógeno aún no descubiertas. Además con la generalización inmediata al caso de átomos con un único electrón (**hidrogenoides**:  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ , etc.) introduciendo la carga nuclear como  $|Z_N e|$ , en lugar de  $|e|$ , en las relaciones anteriores se pudieron explicar también los espectros de estos átomos ionizados (la energía ahora es proporcional a  $Z_N^2$ ). En particular conviene mencionar que esta generalización de (35), incluyendo el factor  $Z_N^2$ , permitió aclarar el hecho de que determinadas líneas observadas primeramente en el espectro de la estrella  $\zeta$  (Zeta) Puppis y que se habían atribuido al hidrógeno (serie de Pickering, 1896-1897) eran en realidad debidas al  $\text{He}^+$ .<sup>xx</sup> En esta identificación final de líneas espectrales, que Bohr discutió en su artículo de 1913, fueron de ayuda también los experimentos en tubos de descarga realizados por A. Fowler en 1912 con mezclas de hidrógeno y helio. Finalmente, el modelo de Bohr condujo a una visualización clara del fenómeno de la **ionización** (figura 8) que corresponde a arrancar un electrón del átomo y que se obtiene para  $n \rightarrow \infty$  (energía nula), siendo el límite matemático para el radio de esta órbita  $r_{n \rightarrow \infty} \rightarrow \infty$  la representación de la separación completa entre el átomo ionizado y el electrón. Los niveles atómicos con energía positiva por encima del valor cero anterior no están “discretizados” y hay un continuo de estados (**estados de colisión**).

Un detalle histórico no muy divulgado es el hecho de que Bohr no fue el primero en aplicar las ideas cuánticas de Planck al problema de la estructura atómica, aunque sí fue el que consiguió dar una primera respuesta satisfactoria al espectro del átomo de hidrógeno y supo ver las implicaciones ocultas detrás de esta nueva frontera del conocimiento. Un año antes del artículo de Bohr, el matemático J. W. Nicholson (1912) avanzó la idea de que la energía total del sistema atómico debería ser un múltiplo entero positivo de la constante de Planck dividida por  $2\pi$ . Esta hipótesis le llevó a obtener

muy buenos resultados cuantitativos para las razones entre las frecuencias observadas en el espectro de la corona solar. No obstante, su hipótesis no explicaba la serie de Balmer ni el principio de Rydberg-Ritz. Entre las entonces especulaciones finales de Nicholson se encontraba la idea de que el objeto a cuantificar podría ser el momento angular de los electrones, .... De estos estudios previos da referencia Bohr en su artículo “*On the constitution of atoms and molecules*” (1913), en el que Bohr comunica la formulación de la primera teoría cuántica de la estructura atómica y gana así “por la mano” a Nicholson en esta empresa.<sup>xxi</sup> A pesar del éxito de Bohr, todavía quedaron defensores de extrañamente complicados y obsoletos modelos atómicos basados en ideas previas a la decisiva aportación de Rutherford, como fue el caso de J. Stark que publicó estas ideas pre-cuánticas en sus *Principia der Atomdynamik* (1915).

## 9. Confirmaciones, mejoras e inadecuación del modelo de Bohr (1914-1916)



La explicación *ad hoc* de Bohr para los espectros atómicos era una prueba indirecta de la existencia en los átomos de los niveles de energía electrónicos que su modelo postulaba. Pero además, una prueba directa de la existencia de estos niveles fue obtenida en 1914 por J. Franck y G. Hertz (no confundir con H. R. Hertz). Estos científicos observaron, en una serie cuidadosa de experimentos, que las colisiones *inelásticas*<sup>xxii</sup> entre electrones y átomos (es decir, con alteración del estado interno átomo) sucedían *únicamente* cuando la energía cinética del electrón incidente era mayor que la que podía calcularse con la diferencia de términos (35) para una transición desde el **estado fundamental** hasta un **estado excitado**. La cantidad de energía perdida por el electrón incidente se determinó que era igual a la necesaria para producir una

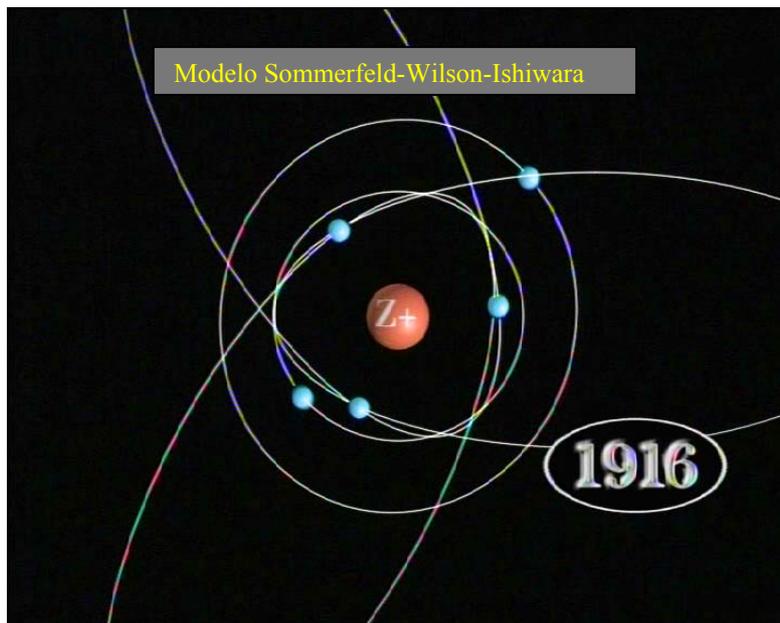
excitación, según podía deducirse de los datos espectrales. Más aún, tras dicha colisión también se podía observar una línea espectral correspondiente a la **emisión** desde el estado excitado alcanzado hasta el estado fundamental. Es interesante mencionar aquí, de pasada, que de los choques entre electrones suficientemente energéticos y moléculas puede resultar la disociación de éstas, cual era el caso de la producción de hidrógeno atómico a partir de moléculas de hidrógeno ( $H_2$ ) en los tubos de descarga mencionado anteriormente.



Consecuentemente, la existencia supuesta por Bohr de los niveles de energía electrónicos en los átomos tenía ya pruebas indirectas (espectros) y directas (experimentos de Franck-Hertz). Sin embargo, aunque el lector puede ahora justificar cualitativamente la aparición de los haces coloreados que se obtenían en los tubos de descarga, el modelo de Bohr no pudo explicar los espectros de los átomos con dos o más electrones. Algo estaba fallando en esa descripción de las órbitas *cuasi-clásicas* que se escapaban artificialmente del colapso del electrón en el núcleo en virtud del postulado iii). Era necesaria una descripción radicalmente diferente.

Es durante los años 1915 y 1916 cuando tres científicos, W. Wilson, J. Ishiwara y A. Sommerfeld, independientemente unos de otros, introducen una generalización al modelo de Bohr a través de las hoy llamadas **reglas de cuantificación** de *Sommerfeld-Wilson-Ishiwara*.<sup>xxiii</sup> La matemática involucrada en este intento de mejora estaba basada en la descripción *hamiltoniana* de sistemas **multiperiódicos** que evolucionan en el **espacio fásico**. Este espacio está tomado de la mecánica estadística clásica y se define mediante un conjunto de ejes ortogonales correspondientes a todas las posiciones e

impulsos de todas y cada una de las  $N$  partículas, que supuestas puntuales implicarían un espacio de dimensión  $6N$ . El lector interesado puede consultar la bibliografía sobre Mecánica Estadística citada en esta Guía para más detalles. En este modelo mejorado aparecen varios **números cuánticos** que definen los valores discretos posibles para las magnitudes características de las nuevas órbitas estacionarias: energía  $E$ , módulo del momento angular  $L$  y una de las componentes de esta magnitud vectorial, convencionalmente  $L_z$ .



Para el caso del electrón en los átomos hidrogenoides, el número cuántico **principal**  $n$  está relacionado con  $E$  en la forma:

$$E_n = -\frac{1}{2} \mu \left( Z_N \frac{e^2}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2}; \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (37)$$

en donde  $\mu$  es la masa reducida (27) y  $Z_N$  la carga del núcleo en unidades de  $|e|$ . El módulo del momento angular está relacionado con el número cuántico **azimutal**  $n_\psi$  mediante

$$L = n_\psi \hbar \quad (38)$$

mientras que su componente  $z$  lo está con el número cuántico **magnético**  $m_z$  como

$$L_z = m_z \hbar \quad (39)$$

Con la ayuda de otros números cuánticos *auxiliares*,  $n_r$  (**radial**),  $n_\theta$  y  $n_\phi$  (**angulares**), los tres *enteros no negativos*, los números cuánticos mostrados en (38)-(39) están relacionados entre sí como sigue:

$$\begin{aligned} n &= n_r + n_\theta + n_\phi ; & n_\psi &= n_\theta + n_\phi ; & |m_z| &= n_\phi \leq n_\psi \\ n &= 1,2,3,\dots & ; & n_\psi &\leq n \end{aligned} \quad (40)$$

Nótese que, aunque formalmente idéntica a la primitiva fórmula de Bohr, la generalización (37) contiene algunas diferencias importantes con aquélla.

La primera es la introducción de la masa reducida para estudiar el problema de los dos cuerpos electrón-núcleo, con lo que la constante de Rydberg no toma el mismo valor para todos los átomos hidrogenoides como se consideraba en el primitivo modelo de Bohr. La constante de Rydberg para un núcleo de masa  $M_N$  viene dada por

$$R_M = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m}{M_N}} \quad (41)$$

que corresponde a poner  $\mu$  en vez de  $m$  en (36). Al aumentar la masa del núcleo  $M_N$  (41) tiende a (36), pero para masas nucleares pequeñas (hidrógeno, helio, etc.) hay desviaciones que pudieron apreciarse experimentalmente con espectrógrafos de creciente *poder de resolución*. Concretamente, este efecto de la masa nuclear sobre las líneas espectrales fue la causa del descubrimiento del deuterio (isótopo del hidrógeno con un neutrón en el núcleo) en 1932 por H. Urey, F. Brickwedde y G. Murphy.<sup>xxiv</sup> Estos investigadores encontraron que cada una de las líneas de la serie de Balmer presentaba una compañera más débil a longitudes de onda menores, líneas que se explicaban utilizando como constante de Rydberg la resultante de tomar una masa nuclear doble de la del hidrógeno. Además este efecto isotópico permitió explicar con toda precisión los espectros del  $\text{He}^+$  y de los átomos hidrogenoides del segundo período hasta el  $\text{O}^{7+}$  inclusive.

La segunda es que un número principal dado  $n$  es compatible con varias descomposiciones en números cuánticos auxiliares: cada una de estas descomposiciones representa un posible estado estacionario y todos ellos comparten un mismo valor de la energía. A este resultado se le denomina **degeneración**. Por ejemplo, al nivel energético asociado con el número cuántico principal  $n$ , le corresponden  $n$  órbitas dadas por  $n_\psi=1, 2, 3, \dots, n$ , y además para cada uno de estos valores la órbita admite  $(2n_\psi + 1)$  orientaciones en el espacio, según  $m_z = -n_\psi, -n_\psi + 1, -n_\psi + 2, \dots, n_\psi - 2, n_\psi - 1, n_\psi$ . Así, para el nivel energético  $n=3$  aparecen dentro de este modelo los siguientes 15 estados estacionarios **degenerados** caracterizados por los números cuánticos:

- $n=3$	$n_\psi=1$	$m_z = -1$	
- $n=3$	$n_\psi=1$	$m_z = 0$	
- $n=3$	$n_\psi=1$	$m_z = +1$	
- $n=3$	$n_\psi=2$	$m_z = -2$	
- $n=3$	$n_\psi=2$	$m_z = -1$	
- $n=3$	$n_\psi=2$	$m_z = 0$	
- $n=3$	$n_\psi=2$	$m_z = +1$	
- $n=3$	$n_\psi=2$	$m_z = +2$	
- $n=3$	$n_\psi=3$	$m_z = -3$	
- $n=3$	$n_\psi=3$	$m_z = -2$	
- $n=3$	$n_\psi=3$	$m_z = -1$	
- $n=3$	$n_\psi=3$	$m_z = 0$	
- $n=3$	$n_\psi=3$	$m_z = +1$	
- $n=3$	$n_\psi=3$	$m_z = +2$	
- $n=3$	$n_\psi=3$	$m_z = +3$	(42)

El número de estados estacionarios **degenerados** asociados con un nivel energético  $n$  dentro del modelo de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara es  $n(n+2)$ , como puede comprobarse fácilmente (una progresión aritmética, en definitiva). Las órbitas de este modelo no se restringen sólo a formas circulares, sino que también incorpora órbitas *elípticas*.

El papel de estos nuevos estados resultó crucial en la “explicación” de Sommerfeld de la denominada **estructura fina** del espectro del átomo de hidrógeno (ya observada por Michelson en 1891-1892) utilizando espectrógrafos de gran poder de resolución. Esta estructura fina consiste en que cada una de las líneas primitivamente observadas es, en realidad, una pareja de líneas muy próximas (**dobletes**). Dado que la energía en este modelo sólo depende de un número cuántico  $n$ , Sommerfeld introdujo correcciones relativistas (*relatividad especial*) que le permitieron justificar cuantitativamente el desdoblamiento de las líneas espectrales a través de una mejorada dependencia de la energía con dos números cuánticos: principal  $n$  y azimutal  $n_\psi$ . Este éxito resultó sorprendente, sobre todo teniendo en cuenta que la coincidencia resultante era completamente fortuita, como se demostraría años después con la ecuación obtenida por P. Dirac. Que este modelo de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara, sin embargo, era incorrecto estaba claro por su incapacidad para explicar los espectros de los átomos con dos o más electrones.

Por otra parte, en 1897 P. Zeeman ya había puesto de manifiesto que las líneas espectrales de emisión atómicas sufrían un desdoblamiento por efecto de campos magnéticos externos: la línea azul del cadmio a 4800 Å daba un **tripleto** equiespaciado sobre la línea central, cuya posición seguía estando a 4800 Å. Este efecto se observó en otros casos, con la particularidad de que el espaciado parecía ser independiente del átomo y sólo función del campo magnético externo aplicado. Este efecto de desdoblamiento equiespaciado (*efecto Zeeman normal*) pudo ser “explicado” por H. Lorentz en 1897 sin más que hacer uso de la teoría electromagnética clásica. No obstante, también en 1897, T. Preston descubrió que los patrones de desdoblamiento bajo campos magnéticos distaban mucho de ser tan regulares como sugerían los experimentos de Zeeman: los desdoblamientos daban *multiplicidades* diversas dependiendo de la línea espectral considerada y, aunque el espaciado entre líneas de un multiplete dado era siempre el mismo, éste dependía del campo magnético y de la línea original considerada (*efecto Zeeman anómalo*). Ejemplos de efecto Zeeman anómalo se observan en los desdoblamientos de: a) la línea del zinc a 4722,16 Å; y b) el par de líneas del sodio a 5889,96 Å y a 5895,93 Å. En resumen, lo que se observaba era que para todas las líneas sencillas (**singletes**) parecía existir el efecto normal, en tanto que para líneas muy próximas (**no singletes**) se manifestaba el anómalo. El modelo

Sommerfeld-Wilson-Ishiwara pudo explicar el efecto Zeeman normal a partir de la cuantización espacial de las órbitas, pero no pudo dar una explicación del efecto anómalo.

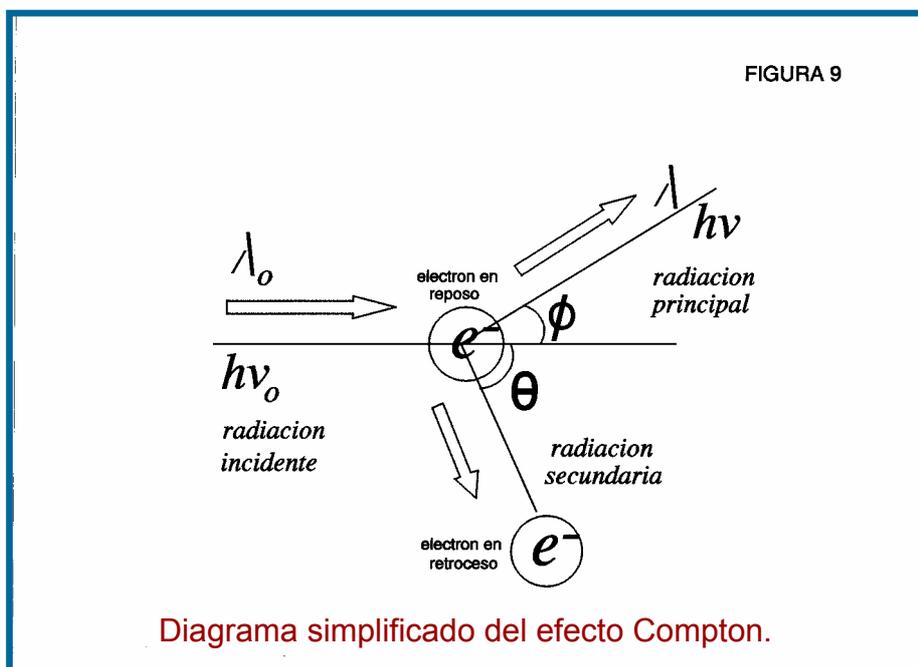
A pesar de sus defectos, el modelo de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara tuvo la virtud de introducir nuevos conceptos que serían importantes en los desarrollos cuánticos posteriores: más de un número cuántico, la existencia de **degeneración** (nótese la diferencia entre un nivel de energía y sus posibles estados degenerados) y el *principio de correspondencia* (para números cuánticos altos se recupera la mecánica clásica como límite). Un interesante descubrimiento por parte de M. Catalán en 1922, con relación a los espectros atómicos, cierra este período de duda e investigación intensa: la estructura de los multipletes en las rayas espectrales del manganeso con las variaciones en las condiciones experimentales al aplicar campos externos. Los resultados de Catalán le llevaron a proponer que los propios términos espectrales involucrados en las transiciones estaban, a su vez cada uno de ellos, desdoblados en varios niveles y de ahí las rayas resultantes procedentes de las transiciones entre los nuevos niveles desdoblados. No es este un resultado del que la bibliografía se haga mucho eco, pero hay que resaltarlo por lo que representó en su momento. Para poder dar cuenta de todos los resultados experimentales que la espectroscopía obtenía eran precisos unos grandes cambios estructurales en el pensamiento de lo que se entendía que era un electrón, en particular, como algo que describía trayectorias clásicas en torno al núcleo atómico. Estos cambios estaban por producirse entre 1923 y 1930 y darían origen a la Mecánica Cuántica.

## 10. La luz, una vez más corpúsculo: efecto Compton (1921-1923)

Se ha comentado anteriormente que la aparente resolución de la controversia onda-corpúsculo para la luz (radiación electromagnética) a favor de la interpretación ondulatoria se había visto amenazada por la explicación de Einstein del efecto fotoeléctrico con los cuantos o paquetes de energía. Entre 1921 y 1923 A. Compton demostró que al hacer incidir rayos-X sobre grafito aparecían dos radiaciones (figura 9): una **principal** análoga a la incidente y (dispersada con ángulo  $\phi$ , figura 9) y otra adicional llamada **secundaria** (o de retroceso y con ángulo  $\theta$ ). Este efecto<sup>xxv</sup> se debe a la difusión de los rayos X por los electrones débilmente ligados en el cuerpo

iluminado.<sup>xxvi</sup> Aunque Compton trató de justificar este efecto con la teoría ondulatoria clásica de la luz, todos sus intentos resultaron infructuosos. La explicación de este efecto (1923) fue dada por el propio Compton, y también por P. Debye, usando la teoría corpuscular de la luz con cuantos (fotones) de energía  $E$  y, además, dotados de un momento (impulso)  $p$ , dados por

$$E = h\nu \quad p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (43)$$



Suponiendo una colisión *elástica*<sup>xxvii</sup> del fotón de rayos-X con uno de estos electrones y utilizando la *mecánica relativista* para fijar la energía del electrón (lo que condujo al resultado de que los fotones son partículas de masa nula), la longitud de onda de la radiación Compton **principal** está dada por la expresión:

$$\lambda = \lambda_0 + \frac{h}{mc}(1 - \cos \phi) \quad (44)$$

en donde  $\lambda_0$  es la longitud de onda de la radiación incidente y  $m$  es la masa en “reposo” del electrón. Como puede verse,  $\lambda$  depende *únicamente* de la longitud de onda incidente y del ángulo definido por los haces de radiación incidente y dispersada **principal**.

Claramente, la longitud de onda incidente es siempre menor o igual que la longitud de onda dispersada **principal**, lo que está de acuerdo con la cesión de energía por la radiación a los electrones débilmente ligados ( $\lambda$  y  $E$  son inversamente proporcionales).

Indiquemos aquí que el propio Compton confirmó sus ideas sobre las longitudes de onda de los rayos X dispersados con experimentos utilizando un espectrómetro de cristal (o de Bragg) y que el predicho retroceso de los electrones fue observado por C. T. R. Wilson y W. Bothe utilizando cámaras de niebla.<sup>xxviii</sup>

### 11. La hipótesis de de Broglie (1923) y su confirmación experimental para el electrón (1927).

Ya hacia 1828 W. Hamilton había notado que las trayectorias de las partículas clásicas determinadas con la mecánica newtoniana son equivalentes a los rayos de un problema de óptica geométrica, cuando la longitud de onda se manipula formalmente de modo adecuado (esta equivalencia se formula con los principios de Maupertuis y de Fermat). No obstante, esta profunda observación cayó en el olvido durante casi un siglo. Fue L. de Broglie quien retomó esta apasionante discusión en un intento de entender la naturaleza dual onda-corpúsculo de la luz y adelantó en 1923 sus ideas (muy atrevidas para la época) sobre este intrigante problema. En la presentación de éstas tuvo que hacer un uso extensivo de la **Teoría de la Relatividad Especial** para establecer la *invariancia Lorentz* de sus ecuaciones, por lo que por razones obvias todos estos detalles no se darán aquí. El lector interesado puede consultar la bibliografía citada para información completa.



La hipótesis de de Broglie es que cualquier cuerpo en movimiento (fotón, electrón, etc.) lleva indisolublemente asociado una onda, de modo que la longitud de onda  $\lambda$  y el impulso  $p$  están relacionados por

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad p = m v \quad (45)$$

Esta ecuación es mucho más general que la segunda de (43) ya que de Broglie la pretendía válida para todos los cuerpos, lo que implicaba que en las circunstancias adecuadas todos los corpúsculos pueden mostrar propiedades ondulatorias. Es fácil de imaginar el escepticismo con que tropezó esta idea: si esto es así, ¿por qué estas propiedades ondulatorias no se observan en la experiencia cotidiana? Notemos que estas propiedades ondulatorias serán más fáciles de observar en cuerpos ligeros que en pesados. Así, aunque un cuerpo macroscópico típico de la experiencia diaria (un vehículo, etc.) lleva asociado su onda, la pequeñez de  $h$  combinada con la gran masa del cuerpo originan una longitud de onda despreciable. En consecuencia, la confirmación de (45) debía entonces involucrar experiencias con partículas muy poco pesadas, siendo de nuevo el **electrón** el candidato ideal.



El año 1927 fue un año decisivo para el futuro de una nueva Mecánica Cuántica, que era compatible con la hipótesis de de Broglie y que, como se verá más adelante, se había ya propuesto recientemente por W. Heisenberg (1925) y por E. Schrödinger

(1926). C. Davisson y L. Germer, por un lado, y G. P. Thomson (hijo de J. J. Thomson) y A. Reid, por otro, pusieron de manifiesto (dentro de los límites de precisión experimental de la época) que los electrones obedecían la relación de de Broglie (45).<sup>xxix</sup> Sus experimentos estaban basados en la difracción de electrones por cristales obteniéndose mapas de difracción que corroboraban (45). En el experimento de Davisson y Germer se utilizó una estructura monocristalina, en tanto que en el de Thomson y Reid se utilizaron películas policristalinas delgadas formadas por un gran número de cristales microscópicos orientados aleatoriamente. Como datos cuantitativos mencionaremos que en el experimento de Davisson y Germer se utilizaron electrones emitidos con energías hasta de 370 eV (1 eV= electrón-voltio $\cong 1,602 \times 10^{-12}$ erg), que difractados por un cristal de níquel (estructura de red cúbica centrada en caras) daban mapas de difracción típicos (análogos a los de rayos X) para los valores de las longitudes de onda que podían obtenerse con la relación (45). En los experimentos de de Thomson y Reid los electrones eran mucho más energéticos. En el próximo epígrafe se verán de un modo simplificado algunas curiosas consecuencias resultantes de este tipo de experimentos.

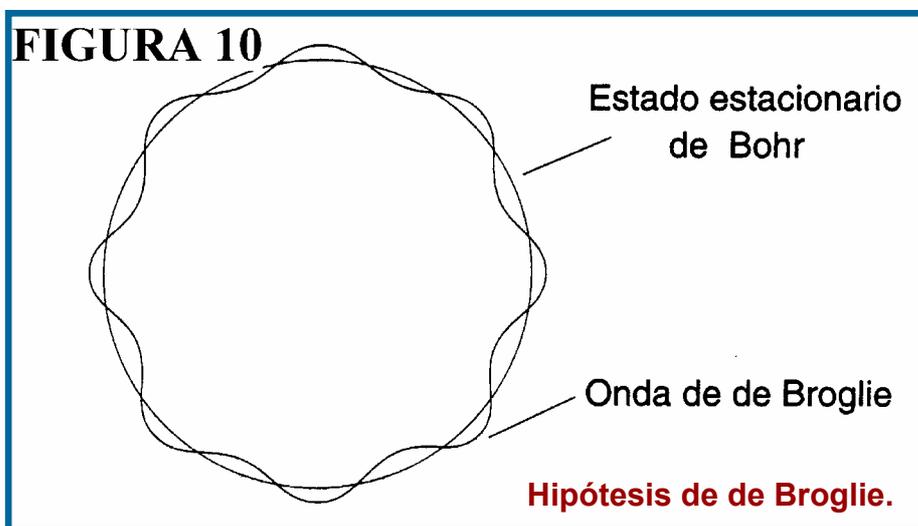


Pero por el momento, ¿qué repercusiones tiene la hipótesis anterior sobre el electrón del átomo de hidrógeno? Dado que el modelo original de Bohr, aunque incorrecto, debe contener parte de la verdad en el caso del átomo de hidrógeno, el primer paso será poner en contacto las ecuaciones (29) y (45), resultando inmediata la siguiente condición que debería cumplir la longitud de onda del electrón:

$$2\pi r = n\lambda \quad ; \quad n = 1,2,3,\dots \quad (46)$$

Esta ecuación indica que para garantizar la existencia de un estado estacionario circular, con energía definida, la longitud de su circunferencia debería ser un múltiplo entero de la longitud de onda del electrón. Esto daría una onda estacionaria como resultado de la interferencia constructiva, mientras que en otro caso no habría onda estacionaria debido a la interferencia destructiva (figura 10).

A estas ondas predichas por la argumentación de de Broglie se las denominó **ondas materiales** (también llamadas **ondas piloto**). Su existencia fue corroborada por I. Estermann, O. Frisch y O. Stern en 1930 en nuevos experimentos de difracción<sup>xxx</sup> que involucraban, primero, átomos de helio y, segundo, moléculas de hidrógeno (véase el Apéndice I). Estos cuerpos son muy diferentes de la partícula elemental que hemos denominado electrón y dejaron patente las propiedades ondulatorias de la materia: átomos y moléculas también se comportan como ondas. Hay que decir que la naturaleza de estas ondas materiales, como algo definido en el espacio físico tridimensional, no iba a resultar tal y como su inventor concibió, sino que iban a resultar unos objetos ciertamente contrarios a lo que la intuición dictaba a primera vista.



Finalmente, conviene aquí mencionar que para, por ejemplo, átomos animados de movimiento térmico por estar bajo el efecto de una cierta temperatura  $T$  (en gases, líquidos o sólidos), su longitud de onda de de Broglie puede obtenerse con la expresión

$$\lambda = \frac{h}{(2\pi M k_B T)^{1/2}} \quad (47)$$

siendo  $M$  la masa de la partícula y  $k_B$  la constante de Boltzmann ( $\cong 1,38 \times 10^{-16}$  erg/K). Cuando esta magnitud es comparable con la distancia media entre las partículas vecinas en un sistema ( $\approx \rho^{-1/3}$ ,  $\rho$  =densidad en número), los efectos ondulatorios de una partícula interfieren apreciablemente con los de sus vecinas y el sistema ofrece unas propiedades (*efecto túnel*, etc.) muy apartadas de lo que cabría esperar clásicamente. Como puede deducirse de (47), para poner de manifiesto las características ondulatorias de cualquier cuerpo basta con someterle a temperaturas muy bajas (un aumento de la densidad de la muestra facilita también la observación de estos **efectos cuánticos**).

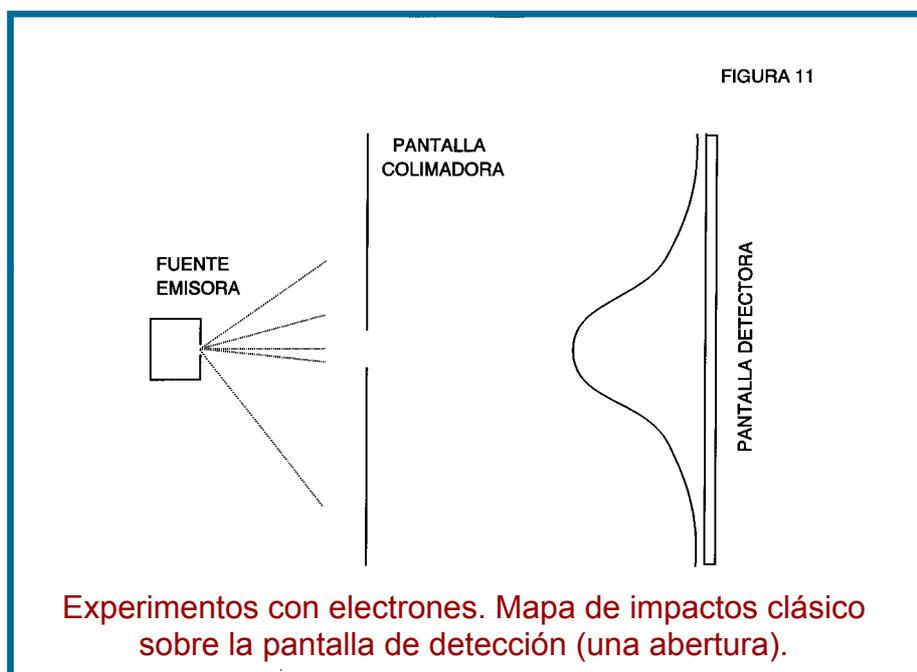
## 12. El experimento de las “dos rendijas” con electrones



A continuación van a analizarse de un modo fácil de visualizar las características fundamentales de la naturaleza ondulatoria del electrón obtenidas en los experimentos mencionados de Davisson y Germer, de Thomson y Reid y de otros científicos. La discusión va a hacerse utilizando los experimentos que de un modo puramente teórico R. Feynman<sup>xxxi</sup> popularizó hacia mediados de los años sesenta del siglo XX. Aunque Feynman creía que estos experimentos no podrían llevarse a cabo en la práctica debido a las escalas de longitud involucradas, su postura era errónea. Se remite al lector al final de las descripciones que siguen para una serie de precisiones históricas muy interesantes en todo este asunto. Antes de discutir los experimentos siguientes nótese que todo el

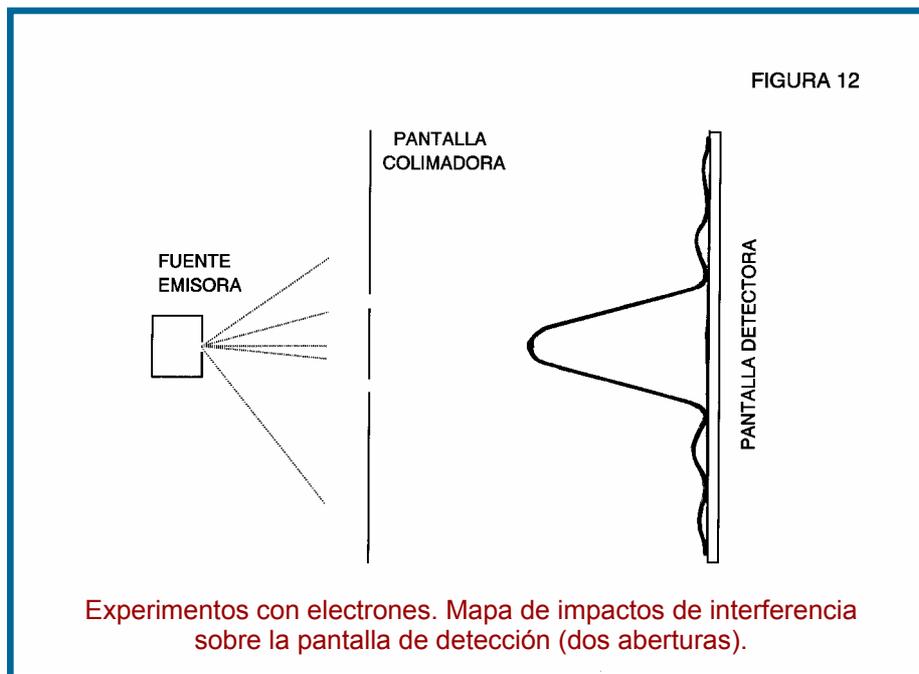
diseño experimental que va a describirse a continuación hay que suponerlo encerrado en una cámara de vacío y que todo el proceso se va a describir de forma muy idealizada.

Situemos una fuente emisora de electrones F (un filamento metálico caliente), que por simplicidad supondremos emitidos todos ellos con la misma energía. Esta fuente está encerrada en una caja que posee una abertura por la que algunos de los electrones emitidos por el filamento escapan. Opuesta a esta abertura y a una cierta distancia se coloca una pantalla de detección D que se ilumina fugazmente cuando un electrón choca sobre ella. Si ahora se interpone entre la fuente y la pantalla una pared con una abertura, se puede construir la función de distribución de probabilidades de los impactos sobre D contando el número de impactos por unidad de área (por ejemplo, dividiendo la pantalla en cuadrículas unidad) y calculando el cociente entre estos números y el total de impactos sobre toda la pantalla. El resultado, con el máximo de impactos alineado con las aberturas en la fuente emisora y en la pared, es completamente análogo (figura 11) al que se obtendría si en vez de electrones se hubieran lanzado (guardando las proporciones) canicas, bolas de billar, pelotas de fútbol o cualquier otro *objeto clásico*. Hasta aquí el comportamiento del electrón es *clásico*.



Sin embargo, una ligera modificación en el dispositivo experimental va a dar un giro inesperado el resultado. Se practica una segunda abertura en la pared interpuesta de

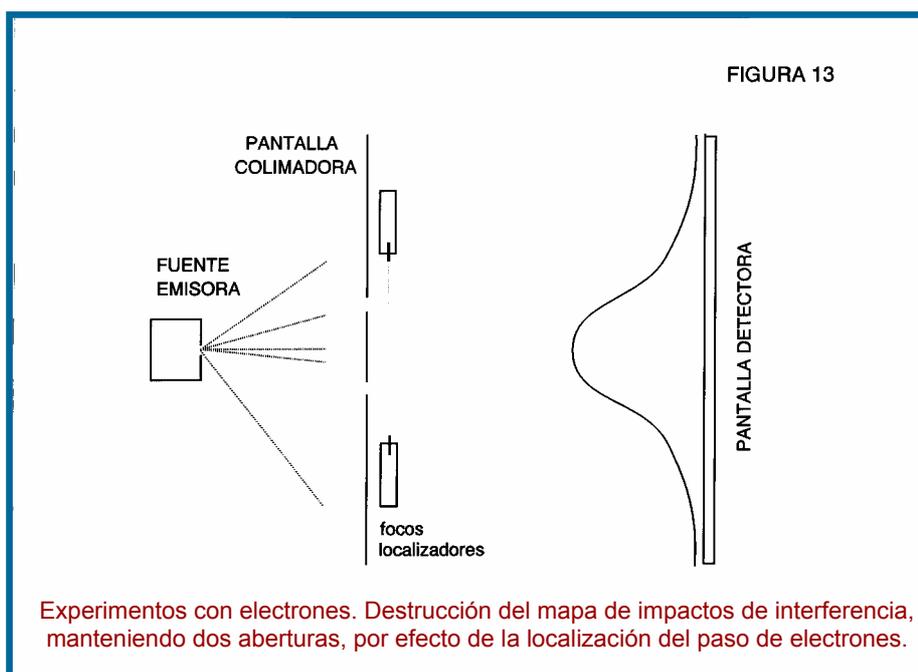
modo que, por comodidad, ambas aberturas queden simétricamente situadas con respecto a la fuente emisora. Repitiendo el lanzamiento de electrones y determinando la nueva función de distribución de probabilidades de los impactos *no se obtiene* la superposición de las dos funciones clásicas correspondientes a cada una de las aberturas por separado: lo que se obtiene es una figura típica de **interferencia** (figura 12), formada por una serie de franjas dispuestas paralelamente entre sí y que son las zonas de impactos. Es muy interesante observar el hecho de que ahora hay regiones, incluso muy próximas al centro (máximo del anterior experimento), en las que prácticamente no se detectan impactos. Si se tiene en cuenta que los electrones son partículas con carga y masa bien definidas, este nuevo resultado no deja de ser sorprendente. ¿Cuál es el extraño mecanismo que origina este comportamiento?



Parece procedente tratar de averiguar por cuál de las aberturas pasan los electrones lanzados. Esto puede lograrse situando detectores (focos luminosos) en las aberturas, de modo que al pasar un electrón por una de ellas se produzca un destello. El dispositivo se prepara de tal manera que ningún electrón que atraviese la pared escape a la detección. La nueva función de distribución de impactos es similar a ¡la suma de las dos distribuciones clásicas asociadas con cada una de las aberturas por separado (figura 13)!<sup>xxxii</sup> Si el comportamiento era ya extraño, ahora lo es aún más. Tal vez todo esto se

deba a que se está utilizando un flujo de electrones y sus interacciones son las responsables de estos fenómenos.

Para decidir con mayor fundamento lo que está sucediendo se puede repetir el experimento ajustando el lanzamiento de electrones de forma que estos salgan espaciados de uno en uno y no en grupos más o menos compactos. Los posibles efectos de interacción quedarán así eliminados. Primero, se realiza el experimento con una abertura y tras haber lanzado un número muy grande de electrones la función de distribución se determina que es como la de la figura 11, es decir un mapa de impactos *clásicos*. Seguidamente, se procede con el experimento de las dos aberturas, se cuentan los choques espaciados contra la pantalla por unidad de área y el resultado final... ¡es de nuevo la figura de **interferencia** (figura 12)! Finalmente, se sitúan detectores en las aberturas para ver por cuál de ellas pasa cada electrón y el nuevo resultado es... ¡otra vez una superposición de impactos **clásicos** (figura 13)!



Claramente, cualquier intento exitoso de determinar la abertura por la cuál pasa un electrón *destruye el fenómeno de interferencia*. Conviene reparar aquí en que, si la detección de electrones en las aberturas no fuera completa y algunos escapan de la detección, la distribución de impactos sería una mezcla ponderada de los mapas clásico y de interferencia. También debe tenerse en cuenta que, por simplicidad, la discusión

sobre la localización de electrones en las aberturas está presentada en una forma altamente ideal. La luz utilizada para localizarlos perturba las trayectorias de los electrones, de manera que el mapa de impactos clásicos **no va a ser igual** al obtenido con la suma de cada abertura independiente. De hecho, puede llegar a ser bastante diferente dependiendo de la energía de la luz utilizada, **pero no mostrará fenómenos de interferencia**. *Lo importante es aquí justamente notar que: a) por la localización se destruye el mapa de interferencias; y b) el electrón impacta siempre en un lugar concreto de la pantalla de detección, y no lo hace de una manera deslocalizada.* Todo esto está relacionado con el concepto de función de onda y con el principio de incertidumbre de Heisenberg, aspectos ambos que se comentarán más adelante.

Parece procedente hacer aquí las anotaciones históricas aludidas arriba sobre este experimento de las dos aberturas. En sus afamadas “*Lectures on Physics*” Feynman (1965) desarrolla este experimento de forma puramente teórica y hace referencia a la imposibilidad material de llevarlo a cabo en la práctica. Estas son unas creencias muy extendidas, posiblemente debido al fuerte (y muy beneficioso) influjo de la obra citada, pero en modo alguno responden a la realidad experimental. De hecho, ya en 1961 C. Jönsson publicó un artículo en *Z. Phys.* (en alemán) sobre la difracción de electrones por múltiples aberturas. Este artículo fue de nuevo publicado en forma traducida al inglés en *Am. J. Phys.* bajo el título “*Electron diffraction at multiple slits*” en el año 1974. Son de destacar su alto valor pedagógico, en todo cuanto al tema de la dualidad onda-corpúsculo se refiere, así como el minucioso análisis de los problemas experimentales presentados en la realización del experimento. Pero no terminan ahí las aportaciones sobre la **interferometría electrónica**. Otros colegas de Jönsson, como P. Holl (1970), J. P. Martin y R. Speidel (1972), continuaron avanzando la microscopía electrónica y las técnicas de producción de aberturas adecuadas para este tipo de experimentos. Más autores también produjeron interesantes trabajos sobre difracción de electrones en experimentos con aberturas. Son de destacar el de P. G. Merli y colaboradores “*On the statistical aspect of electron interference phenomena*” aparecido en *Am. J. Phys* en 1976 y el de A. Tonomura y colaboradores “*Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern*” también aparecido en *Am. J. Phys.* en 1978. De estos interesantes artículos aprendemos que el experimento de las “dos rendijas” con electrones es ciertamente posible y que, entre otros muchos detalles, un tiempo típico de formación de un mapa de interferencia emitiendo electrones de uno en uno es de unos 20 minutos.

Es muy posible que estos trabajos pasaran desapercibidos para la audiencia científica general debido a que fueron publicados en una revista de un corte más divulgativo y educativo que de investigación de punta, pero son sin lugar a dudas unas referencias para ser leídas con gran atención y placer intelectual.

Recapitulando los resultados discutidos anteriormente sobre la difracción de electrones y las características de estas partículas, las conclusiones que hemos alcanzado sobre el electrón son forzosas:

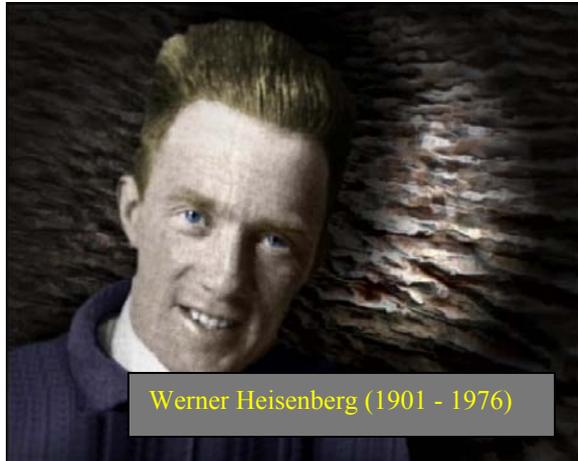
- i) *El electrón es una partícula con carga eléctrica negativa y masa.*
- ii) *Posee propiedades ondulatorias e “interfiere” consigo mismo.*
- iii) *Cuando se le detecta se comporta como un corpúsculo clásico.*

Esta dualidad onda-corpúsculo es un misterio básico de la naturaleza tal y como la entendemos. La aceptación de este paradójico resultado es obligatoria pues todas las evidencias experimentales y teóricas acumuladas en los últimos cien años apuntan inexorablemente en esa dirección. Hay que insistir en que este tipo de comportamiento (*interferencias cuánticas*) no sólo le pertenece al electrón, sino también a otras partículas atómicas, núcleos, átomos y moléculas (ver el Apéndice I). También en los sistemas macroscópicos (gases, líquidos y sólidos), a temperaturas suficientemente bajas y densidades suficientemente altas, estos fenómenos de interferencia se manifiestan en formas sorprendentes alterando las propiedades esperadas de las sustancias.

Ahora bien, esta capacidad dual del electrón, tal que si no se le detecta se comporta como onda y cuando sí se le detecta lo hace como partícula clásica, ¿responde a algo más profundo y que pueda ser entendido en términos matemáticos?

## D. LA MECÁNICA CUÁNTICA

### 13. El nacimiento de la Mecánica Cuántica (1925-1927)



En 1925 W. Heisenberg encontró un sistema matemático, la Mecánica Matricial, que renunciando a los conceptos clásicos de trayectoria para las partículas parecía adaptarse a las nuevas realidades en la escala atómica. El joven Heisenberg estaba interesado en principio por el átomo de hidrógeno, pero las dificultades matemáticas le llevaron a abordar un problema más simple como era el del oscilador inarmónico. Con este modelo abordó la construcción de una nueva mecánica. Aunque desconocía el concepto de matriz, por razones de consistencia con los datos que manejaba, Heisenberg reinventó tanto este concepto como sus propiedades algebraicas (de multiplicación, etc.). Todo esto lo hizo encontrándose convaleciente de fiebre del heno en la isla de Helgoland, según cuenta él mismo. Heisenberg logró demostrar que su nuevo esquema llevaba a expresiones consistentes para la energía, la constancia de ésta en el tiempo, y las frecuencias esperadas para las transiciones. Un poco después, también en 1925, M. Born y P. Jordan encontraron que de la formulación de Heisenberg se deducía naturalmente la relación de conmutación posición-impulso y, seguidamente, colaboraron con Heisenberg para dar una forma matemática satisfactoria a la Mecánica Matricial publicando el conocido como “trabajo de los tres hombres”. La abstracción de este formalismo no lo hizo precisamente muy popular, pues en particular el dominio de las matrices no estaba por entonces tan extendido como para propiciar su manejo. No obstante, hacia finales del mismo año, W. Pauli utilizó con éxito este formalismo para explicar correctamente el espectro de hidrógeno atómico incluso en presencia de campos eléctricos y magnéticos.



Erwin Schrödinger (1887 – 1961)

Por otra parte, y volviendo a las propiedades ondulatorias del electrón, ¿se podría obtener una formulación matemática más accesible para este comportamiento? La hipótesis de de Broglie ya era de dominio público entre los científicos y todo hacía sospechar que el electrón, como ya sabemos, participara de ella. Es en 1926 cuando E. Schrödinger, al que “repugnaba” la Mecánica de Heisenberg, propuso su famosa ecuación de ondas para representar a la función del estado del electrón. En el caso del átomo de hidrógeno esta ecuación dependiente del tiempo es<sup>xxxiii</sup>

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(X, Y, Z, x, y, z, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2M_N} \nabla_N^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_e^2 - \frac{e^2}{r} \right] \Psi(X, Y, Z, x, y, z, t) \quad (48)$$

en donde la función  $\Psi$  depende de las coordenadas del núcleo  $(X, Y, Z)$  y del electrón  $(x, y, z)$ ,  $M_N$  es la masa del núcleo,  $m$  la del electrón,  $r$  es la distancia núcleo-electrón y el operador laplaciano  $\nabla_j^2 = \sum_{i=1}^3 \partial^2 / \partial x_i^2$  actúa sobre las coordenadas del núcleo ( $j=N$ ,  $x_1 = X$ ,  $x_2 = Y$ ,  $x_3 = Z$ ) o del electrón ( $j=e$ ,  $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$ ,  $x_3 = z$ ). De particular importancia es el caso **estacionario** restringido a la masa reducida del sistema ( $\mu \cong m$ ) y que puede tomarse como una muy buena aproximación a la ecuación de Schrödinger para el electrón en el campo del núcleo

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (49)$$

y que surge de tomar la forma siguiente para la función de ondas total  $\Psi = \psi \exp(-iEt/\hbar)$ . Esta es una ecuación diferencial en derivadas parciales, de **valores propios** (tipo auto-adjunto), que una vez resuelta da tanto las soluciones estacionarias  $\psi$  (**funciones propias** o estados) como las energías  $E$  (**valores propios**) asociadas a ellas. Estos estados estacionarios de Schrödinger para el electrón del átomo de hidrógeno son funciones que dependen de tres números cuánticos  $n$ ,  $l$  y  $m$

$$\Psi = \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) \quad (50)$$

en donde se utilizan coordenadas polares esféricas centradas en el centro de masas del sistema de las dos partículas (prácticamente el núcleo). Estos números cuánticos cuantifican la energía ( $n$ ), el momento angular orbital ( $l$ ) y una de las componentes de este último ( $m$ ), arbitrariamente la componente  $z$ . Sus posibles valores y relaciones son

$$n = 1, 2, 3, \dots ; \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1 ; \quad m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l \quad (51)$$

y la energía y el momento angular de los estados vienen dados por:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad L^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad L_z = m\hbar \quad (52)$$

en donde debe notarse la dependencia  $m = m(l)$ , por lo que en muchos textos  $m$  se denota como  $m_l$ . El valor  $E_n$  anterior está en completo acuerdo con la sencilla expresión de Bohr, una vez mejorada con la masa reducida (32)-(37) ( $Z_N = 1$ ). Al igual que en la extensión de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara el fenómeno de la **degeneración**, aunque diferente, está también presente aquí: cada nivel energético tiene  $n^2$  estados estacionarios asociados. Además ahora las magnitudes correspondientes al momento angular son distintas de las de aquel modelo (38)-(39).

Los nuevos estados “onda” de Schrödinger son el paralelo de los estados estacionarios de Bohr. Si se recuerda, los estados estacionarios de Bohr venían representados por órbitas circulares. ¿Qué visualización de los estados de Schrödinger puede hacerse? Esta pregunta levantó grandes controversias en aquellos momentos (incluso hoy día la discusión, aunque muy atenuada, continúa). El mismo Schrödinger atribuía a sus soluciones una naturaleza de “onda material” en línea con de Broglie y

con argumentaciones ondulatorias clásicas sobre el electrón. Un buen número de discusiones en las Conferencias Solvay quinta y sexta (1927, 1930),<sup>xxxiv</sup> en las que tanto Bohr como Einstein jugaron un papel decisivo, llevaron a la aceptación por prácticamente la mayoría de los científicos (Einstein nunca figuró en este grupo mayoritario) de la conocida como *interpretación de Copenhague*. Born, uno de los padres de esta interpretación, había ya propuesto un sentido físico para la función de ondas (1926) que para el electrón del átomo de hidrógeno puede resumirse así: *en sí misma  $\Psi$  no contiene ninguna información física (en general) relativa a alguna distribución real de materia, se trata sólo de una solución matemática que da una amplitud de probabilidad; el sentido físico está en el cuadrado de  $\Psi$  que representa la densidad de probabilidad en el espacio tridimensional de encontrar al electrón.*<sup>xxxv</sup> Esta interpretación se precisa más después teniendo en cuenta que la función de onda puede ser una magnitud compleja. Las reminiscencias con la teoría de ondas (Born era un experto en ésta) son claras: los mapas de interferencia son en definitiva amplitudes al cuadrado. Mencionemos que, en general, los estados estacionarios tienen una densidad de probabilidad que permanece constante en el tiempo. Además, los estados solución de una ecuación de Schrödinger del tipo (49) forman una base (salvando las diferencias, análoga a la de un espacio vectorial) para el espacio de Hilbert asociado al sistema. No obstante, hay que señalar que, contra lo que se pensaba en esos tiempos de descubrimiento, *la función de onda, además de ser la amplitud de probabilidad mencionada, posee en sí misma elementos de realidad física comprobables experimentalmente*, algo de lo que se tratará someramente después en conexión con el espín. Por otra parte, en la generalización a sistemas compuestos por más de una partícula es donde esta interpretación de Born, que recurría al espacio configuracional abandonando el espacio tridimensional real, encontró su mejor justificación.

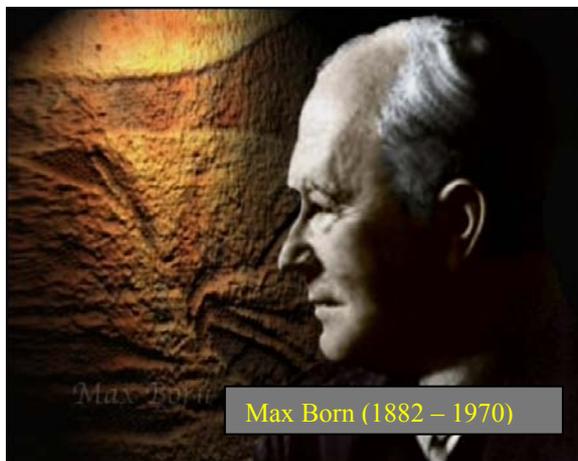
¿Cómo se interpreta entonces el experimento de las dos rendijas utilizando este concepto? Si se asocia una amplitud de probabilidad  $\psi_1$  al fenómeno el electrón pasa por la rendija 1 y la amplitud de probabilidad  $\psi_2$  al fenómeno el electrón pasa por la rendija 2, la “receta” cuántica de Born es como sigue. Primero, se suman estas amplitudes de las dos posibilidades  $\Psi = \psi_1 + \psi_2$ , siendo esta nueva amplitud suma la amplitud asociada con el experimento completo relativo al electrón. Segundo, se construye la probabilidad de este experimento como el cuadrado (complejo)

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = (\psi_1^* + \psi_2^*)(\psi_1 + \psi_2) = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2 \operatorname{Re}(\psi_1^* \psi_2) \quad (53)$$

en donde los términos módulo al cuadrado son las probabilidades asociadas al paso independiente del electrón por cada rendija, como si el fenómeno fuera clásico, en tanto que el término *parte real* (Re) modifica esa suma de probabilidades clásicas y define finalmente el mapa de interferencia (el complejo conjugado se denota aquí mediante \*). Pero, en definitiva, el lector puede seguir preguntándose: ¿el electrón pasa o no pasa por las dos rendijas a la vez?, o ¿qué propiedades tiene el electrón cuando no se le observa?<sup>xxxvi</sup> No tenemos forma de saberlo, como se deduce de toda la discusión presentada. Lo que se puede decir es que al abandonar la barrera con las dos rendijas la situación se describe mediante una distribución de probabilidad  $|\Psi|^2$ , que no es uniforme, y que el impacto del electrón sobre la pantalla de detección es un fenómeno probabilista que sigue dicha función de distribución de probabilidades. El electrón se manifiesta como onda o como partícula dependiendo de cómo se le “pregunte”. En este sentido, hoy se admite que las propiedades del electrón cuando no se le observa son *indeterminadas*.

Aceptada la interpretación operativa de Born para trabajar con funciones de onda  $\Psi$ , dado que la probabilidad de encontrar a la partícula (el electrón, o la masa reducida) en todo el espacio tiene que ser la unidad, la condición de **normalización** habitual en la teoría de probabilidades se escribirá en el caso estacionario como

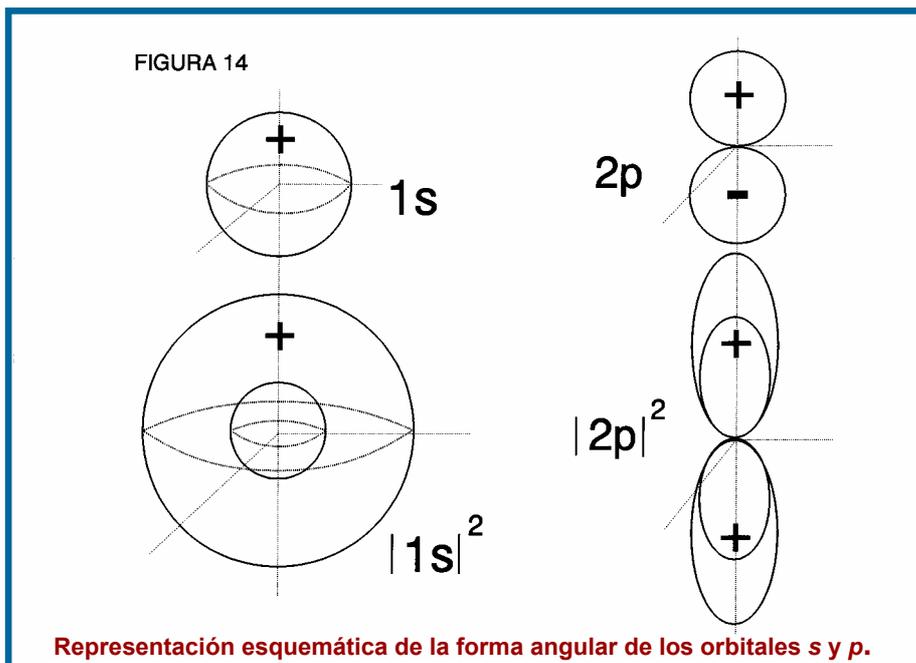
$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n,l,m}(x, y, z)|^2 dx dy dz = 1 \quad (54)$$



donde se tiene en cuenta: a) que la función  $\psi$  puede ser una función compleja, de ahí el módulo al cuadrado escrito; y b) que los factores temporales exponenciales de  $\Psi$  y  $\Psi^*$  al multiplicarse dan la unidad. La ecuación (54) se generaliza directamente para funciones no estacionarias  $\Psi(x, y, z, t)$  integrando igualmente sobre todo el espacio. Volviendo al caso estacionario, como el problema involucra cuatro variables, la representación gráfica debe hacerse recurriendo a superficies de nivel, dejando una variable fija y estudiando la forma de la función  $|\psi_{n,l,m}|^2$  resultante de esta restricción. Nótese que un cambio a coordenadas polares es de gran ayuda en esta tarea. A estos estados se les denomina **orbitales** y, convencionalmente, a los primeros de ellos (de mayor a menor estabilidad medida por  $n$ ) se les denota del modo siguiente (ver figura 14)

$1s$	$\rightarrow$	$n = 1$	$l = 0$	$m = 0$	(más estable)
$2s$	$\rightarrow$	$n = 2$	$l = 0$	$m = 0$	
$2p_x$	$\rightarrow$	$n = 2$	$l = 1$	$m = -1$	
$2p_y$	$\rightarrow$	$n = 2$	$l = 1$	$m = 0$	
$2p_z$	$\rightarrow$	$n = 2$	$l = 1$	$m = +1$	
$3s$	$\rightarrow$	$n = 3$	$l = 0$	$m = 0$	
$3p_x$	$\rightarrow$	$n = 3$	$l = 1$	$m = -1$	
$3p_y$	$\rightarrow$	$n = 3$	$l = 1$	$m = 0$	
$3p_z$	$\rightarrow$	$n = 3$	$l = 1$	$m = +1$	
$3d_{z^2}$	$\rightarrow$	$n = 3$	$l = 2$	$m = -2$	
$3d_{x^2-y^2}$	$\rightarrow$	$n = 3$	$l = 2$	$m = -1$	
$3d_{xy}$	$\rightarrow$	$n = 3$	$l = 2$	$m = 0$	
$3d_{yz}$	$\rightarrow$	$n = 3$	$l = 2$	$m = +1$	
$3d_{xz}$	$\rightarrow$	$n = 3$	$l = 2$	$m = +2$	(55)
.....					

En la notación anterior hay que entender que, en ausencia de algún campo externo que marque una dirección privilegiada, dada la isotropía del espacio, no hay nada especial en el orden  $m$  (con  $l$  fijo) para nombrar los orbitales dentro de un nivel degenerado, los papeles de estos orbitales son intercambiables. Es decir, el grupo de orbitales  $2p$  ( $2p_x, 2p_y, 2p_z$ ) podría haberse nombrado igualmente ( $2p_y, 2p_z, 2p_x$ ) o con cualquier otra permutación de las etiquetas de dirección.



Schrödinger demostró en 1926 (e independientemente C. Eckart y otros) que su formulación de la Mecánica Ondulatoria y la Mecánica Matricial de Heisenberg eran equivalentes y servían para describir una misma realidad. Las predicciones de esta nueva Mecánica explicaban también los espectros del hidrógeno y de los hidrogenoides. Incluso, también en 1926 Heisenberg sentó las primeras bases teóricas para explicar el espectro del helio considerando explícitamente el efecto de la repulsión entre sus dos electrones y también lo que este científico denominó *degeneración de resonancia*, efecto que imponía ciertas restricciones a la forma de la función de onda electrónica total con respecto al intercambio de electrones (véase más adelante). Esta explicación de Heisenberg, aunque llevaba a una excelente coincidencia con los valores experimentales observados, distaba aún de ser la correcta: las sutilezas del espín electrónico no estaban aún entendidas completamente.

Este es el punto de partida de la Mecánica Cuántica. El ya apuntado descubrimiento experimental de la naturaleza ondulatoria del electrón en 1927 fue un espaldarazo definitivo para esta teoría. En todo su desarrollo posterior la renuncia al conocimiento clásico *simultáneo* de las posiciones e impulsos se reveló básica, ya que apoyándose en estos conceptos también los espectros del resto de los átomos pudo explicarse con todo lujo de detalles. Pero, una vez más, hubo que introducir nuevos conceptos y desarrollos.

Más en concreto, el anterior comportamiento dual del electrón (y en general de todas las partículas cuánticas: átomos, moléculas, etc.) tiene también una formulación matemática en el *principio de indeterminación (o incertidumbre)* de Heisenberg (1927). En su forma posiblemente más popular este principio se expresa como: “*No se pueden conocer simultáneamente y con toda precisión los valores de la posición y del impulso de un electrón*”. Sin embargo, este enunciado debe ser detallado en el sentido siguiente. Cuando se dice posición e impulso hay que entender que estas variables son vectores (definidas por *operadores vectoriales*)  $\mathbf{r}(x,y,z)$ ,  $\mathbf{p}(mv_x, mv_y, mv_z)$ , y además que la indeterminación se refiere únicamente a las parejas de variables **canónicamente conjugadas**  $(x, p_x)$ ,  $(y, p_y)$  y  $(z, p_z)$ . Existe un límite cuantitativo a la precisión con que se pueden conocer estas parejas. Su formulación exacta es ( $\Delta$ =error)

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2 \quad (56)$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \hbar/2 \quad (57)$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \hbar/2 \quad (58)$$

Esto significa que no existe ningún impedimento al conocimiento exacto y simultáneo de otros pares de variables como  $x$  y  $p_y$  ó  $p_x$  y  $p_z$ , por ejemplo. Conviene hacer hincapié en que las dimensiones de los productos en (56)-(58) son las de una **acción física** (dimensiones de la constante de Planck) y que otras parejas diferentes de variables que guarden las mismas características también tienen una relación de indeterminación análoga.<sup>xxxvii</sup> El ejemplo más típico es el par energía-tiempo, para el que este principio se expresa

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2 \quad (59)$$

desigualdad que para un sistema físico simboliza la relación entre la indeterminación en su energía y el intervalo de tiempo característico de evolución de tal sistema. Dicho en otros términos, una determinación de la energía con un error  $\Delta E$  debe llevar al menos un tiempo  $\Delta t$  del orden de  $\hbar/2\Delta E$ .<sup>xxxviii</sup>

Es fácil ver en estas ecuaciones que cuanto mayor es la precisión en una medida de una de las variables, la precisión en la medida de su conjugada decrece, al ser mayor el error de ésta. Dada la pequeñez de la constante de Planck queda claro el porqué este principio sólo tiene aplicación significativa en el dominio de las partículas elementales, atómicas y moleculares, careciendo de trascendencia práctica en la realidad macroscópica cotidiana. Si se aplicara a un vehículo en una carretera, o incluso a una persona, indudablemente que existiría una indeterminación cuántica en la medición conjunta de sus posiciones y velocidades, pero éstas serían absolutamente despreciables comparadas con los valores reales y los errores de medida que pudieran asignarse a su posición y velocidad. La motivación de este principio reside en el hecho de que la observación de un sistema de dimensiones submicroscópicas perturba su estado, de modo que no se puede predecir exactamente el nuevo estado en el que el sistema queda después de la observación. Por ejemplo, razonando a la vieja usanza, para observar la posición de un electrón se debería utilizar una radiación de una longitud de onda comparable al “tamaño” de éste. Pero tal radiación, necesariamente de longitud de onda muy corta, sería muy energética (43) y el electrón recibiría así, por choque con estos fotones, un incremento de energía (o si se quiere una variación en su impulso) que le situaría en un estado no predecible *a priori*. Esta es la razón de la **destrucción del mapa de interferencias** por efecto de la localización mencionada anteriormente en el epígrafe 12.

Para concluir este apartado, conviene insistir en que la formulación de Heisenberg fue anterior a la de Schrödinger, si bien la última resultó más accesible y cómoda para las aplicaciones prácticas. También hay que señalar que la ecuación de Schrödinger fue un descubrimiento en el sentido completo de la palabra: no existe ninguna deducción o demostración rigurosa de ella, su obtención estuvo basada en argumentos de analogía con las ondas clásicas convencionales. Está aquí indicada la precisión algebraica siguiente. Las ecuaciones de Schrödinger, la dependiente del tiempo y la estacionaria, son dos resultados “triviales” derivados (teorema de Stone) de la presuposición de la existencia en el espacio de Hilbert asociado al sistema de un **grupo dinámico** que rige la evolución del sistema. Nótese la elevación en el nivel de abstracción implicada en la sentencia anterior. Por último, el principio de Heisenberg es algo mucho más profundo de lo que parece a la vista de la discusión sobre la medición anterior. Este principio está ligado a la estructura íntima de la materia en la escala de las

partículas que se ha señalado, siendo su relación con los procesos de “medida física” de propiedades una consecuencia y no una necesidad apriorística. Así cualquiera de las relaciones (56)-(58) expresa el hecho de que a los observables posición e impulso, en tanto compartan la misma etiqueta de dirección espacial, les corresponden **operadores** que *no conmutan*. Desde el punto de vista práctico, esto significa que el resultado de medir, por ejemplo, primero  $x$  y luego  $p_x$ , no es el mismo que el de medir primero  $p_x$  y luego  $x$ . Todo esto tiene su expresión formal a través de los conmutadores de Heisenberg y las **reglas de simetrización** de operadores, pero no es este el lugar para entrar en estos desarrollos.

#### 14. Algunos conceptos avanzados: el espín y sus consecuencias.

Ya se ha mencionado anteriormente la existencia de la **estructura fina** en el espectro atómico del hidrógeno, consistente en que ciertas líneas que se pensaban eran simples aparecían desdobladas en parejas de líneas muy próximas cuando se utilizaban espectrógrafos con gran poder de resolución. Los intentos de Sommerfeld, haciendo intervenir a la *Teoría de la Relatividad*, le llevaron a una fórmula relativista de la energía de los estados dependiente de dos números cuánticos  $n$  y  $n_{\psi}$ . Aunque la degeneración de los estados de este modelo era incorrecta, esta dependencia de dos parámetros permitió dar cuenta de la estructura fina en el átomo de hidrógeno y del helio ionizado (una vez). La estructura fina que podía observarse en los espectros de los átomos alcalinos y alcalinoides era análoga a la que presentaban hidrógeno e hidrogenoides. Sin embargo, los desdoblamientos experimentales en los átomos alcalinos eran mucho mayores que los que se podían calcular con esta idea relativista. Así pues, no parecía probable que la explicación de Sommerfeld fuera correcta.

Para lograr la explicación correcta hubo de introducirse una propiedad adicional que posee el electrón y que, además, resulta decisiva en el estudio de sistemas polielectrónicos: el **espín** (del inglés “giro”). Hacia 1921 Compton había especulado con la posibilidad de existencia de este “giro” del electrón sobre sí mismo, pero no continuó por esta línea de pensamiento. En 1925 W. Pauli formulaba el *principio de exclusión*: “*En un átomo polielectrónico no puede existir más de un único electrón en cada estado cuántico*”, y presentaba de un modo puramente matemático *cuatro* números cuánticos para caracterizar cada estado de un electrón en un átomo. Este es el principio

fundamental subyacente en la regla de llenado de orbitales en la Tabla Periódica de los elementos químicos.



La lectura del artículo de Pauli llevó a dos jóvenes investigadores, G. Uhlenbeck y S. Goudsmit (1925), a pensar que cada número cuántico correspondía a un grado de libertad para el electrón, por lo que, dentro de su concepción del electrón como partícula puntual, tres números cuánticos estarían asociados con los tres grados de libertad convencionales en el espacio, mientras que el cuarto número cuántico debería estarlo con una rotación del electrón sobre sí mismo. Los tres números cuánticos espaciales, tanto del modelo de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara como del de Schrödinger, iban unidos a la energía y al momento angular orbital. Análogamente, el nuevo cuarto número cuántico debería pues estar asociado con el momento angular intrínseco del electrón en una forma totalmente equivalente a la de  $l$  con  $L$  y  $L_z$

$$S^2 = s(s+1)\hbar^2 \quad S_z = m_s \hbar \quad (60)$$

El valor de este espín  $s$  para el electrón fue fijado en

$$s = 1/2 \quad (61)$$

y la componente  $z$  del momento angular de espín quedaba definida por sus dos posibles proyecciones proporcionales a

$$m_s = +1/2; -1/2 \quad (62)$$

el valor positivo denominándose convencionalmente espín “arriba” y el negativo espín “abajo”.



Como se ha indicado la Mecánica Cuántica de Schrödinger-Heisenberg no incorpora al espín en su formulación. No obstante, es compatible con esta nueva noción en tanto esta propiedad se introduzca de un modo axiomático. Esto se conoce como la *Mecánica Cuántica* “completada con el espín de Pauli”. Notemos de pasada que el espín trae una degeneración  $2n^2$  para cada número cuántico principal  $n$ . Este avance fue muy fructífero y permitió explicar los anteriores asuntos pendientes. En cualquier caso, la *Mecánica Cuántica* estaba incompleta, ya que no existía más argumento para la introducción del espín que el de la absoluta necesidad de hacerlo. Esta situación poco satisfactoria quedó subsanada en 1928 cuando P.A.M. Dirac comunicó su formulación de la *Mecánica Cuántica* para el electrón, que resultaba ser perfectamente compatible con la *Teoría de la Relatividad Especial*.<sup>xxxix</sup> De esta generalización de Dirac, que engloba a la Mecánica de Schrödinger-Heisenberg como caso particular en *el límite no relativista*, surgió de manera natural el espín.<sup>xl</sup> Si bien este nuevo espín retiene en el caso límite Schrödinger-Heisenberg las propiedades anticipadas por Pauli, ya no puede ser visualizado como un “giro”: el espín es un objeto matemático complicado (**espinor**) que describe efectos puramente cuánticos, no tiene análogo clásico, y está estrechamente ligado a la descripción relativista del universo. A pesar de esta precisión histórica, que conecta al espín del electrón directamente con la relatividad einsteniana, el espín del electrón es una consecuencia natural de la isotropía del espacio tridimensional. Incidentalmente, y en conexión con Dirac, nótese que a la constante  $\hbar$  se la denomina la constante de Dirac. También hay que mencionar que el propio

Schrödinger había anticipado ya en 1926 una ecuación relativista (especial), pero que involucraba efectos no lineales en las derivadas espaciales y temporales (una segunda derivada temporal, etc.) y no servía para describir electrones. Esta aportación de Schrödinger se demostró posteriormente, por W. Pauli y V. Weisskopf en 1934, que resultaba apropiada para describir partículas de espín nulo tanto con carga positiva como negativa (en particular, el intento de relativista de Schrödinger sirve para estudiar al mesón  $\pi$ ). Dirac fue capaz de eliminar adecuadamente estos efectos no lineales y de llegar a así a su ecuación, válida para todas las partículas de espín  $1/2$ .<sup>xli</sup>

Conviene indicar aquí que, además de la evidencia espectroscópica, algunos experimentos realizados con haces atómicos en presencia de campos magnéticos no uniformes habían también apuntado hacia la existencia del espín a través de la manifestación de un momento magnético en los átomos: en 1922 el experimento de W. Gerlach y O. Stern<sup>xlii</sup> con átomos de plata y en 1927 el de T. E. Phipps y J. B. Taylor con átomos de hidrógeno. Es interesante señalar aquí, no obstante, que la interpretación inicial dada por Stern y Gerlach a los resultados de su experimento estaba basada en el modelo de Bohr-Sommerfeld que predecía que el haz de átomos de plata debería separarse bajo la acción del campo magnético como consecuencia de la cuantización espacial de los orbitales (el resultado esperado clásicamente era el un único depósito de átomos depositados en la placa receptora). Las líneas (o depósitos) discretas formadas sobre la placa receptora del montaje experimental con los átomos de plata así separados no fueron identificadas pues como resultado de la cuantización del espín (no existía aún este concepto), pero su naturaleza pudo ser perfectamente entendida a partir de la introducción del espín por parte de Pauli en 1925.

Con la aportación de Dirac la situación quedó completamente clarificada. La existencia de este nuevo momento angular de espín lleva consigo la de un **momento magnético intrínseco** en el electrón. Centrándonos en el electrón del átomo de hidrógeno, para concretar, el desdoblamiento mencionado de la **estructura fina** puede entonces entenderse como producido por el acoplamiento entre los dos momentos magnéticos que genera el electrón: el intrínseco y el resultante de su “movimiento” orbital. A esta interacción **espín-órbita** se la denomina acoplamiento  $l$ - $s$  y de ella puede deducirse la existencia de un **momento angular total J** ( $=L+S$ ) para el electrón que se

caracteriza de modo análogo a los pares ya conocidos  $\{L^2, L_z\}$  y  $\{S^2, S_z\}$ . Las ecuaciones son las esperadas

$$J^2 = j(j+1)\hbar^2 \quad J_z = m_j \hbar \quad m_j = m_l + m_s \quad (63)$$

en donde necesariamente  $j > 0$  y  $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ , de modo que: a) para  $l = 0$ ,  $j = +1/2$ ; y b) para  $l \neq 0$ ,  $j = l \pm 1/2$ .

El acoplamiento  $l-s$  indica que los estados inicialmente degenerados con energía  $E_n$  se verían afectados rompiéndose su degeneración. Las nuevas energías se verían: a) ligeramente aumentadas en una cantidad positiva si el espín es “arriba”,  $m_s = +1/2$  y  $j = l + 1/2$ ; b) ligeramente disminuidas en una cantidad negativa si el espín es “abajo”,  $m_s = -1/2$  y  $j = l - 1/2$ ; o, c) inalteradas si el estado es de simetría esférica “s”,  $l = 0$  y  $j = +1/2$ . Tales correcciones son pequeñas pero no despreciables. Por ejemplo, para  $n = 2$  y  $l = 1$  en el átomo de hidrógeno, la corrección es  $\approx 10^{-4}$  eV, lo que debe compararse con el valor  $E_2 \cong 10,1$  eV.

Hay otro punto muy sutil aún y que está conectado con las *correcciones relativistas* para el electrón del átomo de hidrógeno, para ser precisos con la masa del electrón. Estas nuevas correcciones son del mismo orden de magnitud que las que surgen del acoplamiento  $l-s$ , por lo que todas deben ser tenidas en cuenta. La respuesta la da el tratamiento con la ecuación de Dirac: la energía de los estados del átomo de hidrógeno depende de los números cuánticos  $n$  y  $j$ , siendo tal que para un valor  $n$  dado es una función creciente con el número cuántico  $j$

$$E_{n,j} = -\frac{R_H ch}{n^2} \left( 1 + \frac{\alpha^2}{n} \left\{ \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right\} \right) \quad (64)$$

donde  $R_H$  está dada por (41) ( $M=H$ ) y  $\alpha = 1/137,036$  es la llamada constante de estructura fina.

Con ello se daría el desdoblamiento sobre la línea inicialmente simple al existir no un estado sino dos (el lector puede comprobar esto al dar valores a  $l$ ). Los dobletes se originarían en la transición de emisión desde estos estados “dobles”, muy próximos entre sí, hasta un estado que permanece sencillo, tal y como sucede en las series de Lyman del hidrógeno e hidrogenoides. Todavía quedan más sutilezas en el espectro del hidrógeno, como la estructura hiperfina que se origina, no por efecto isotópico, sino por el acoplamiento adicional del  $\mathbf{J}$  total del electrón con el espín nuclear (el protón tiene espín  $1/2$ ), pero todo ello desborda los límites de esta Guía Didáctica. Este tipo de efecto tiene aplicaciones prácticas muy importantes, como es la definición precisa del segundo y otras.<sup>xliii</sup>

El espín del electrón  $s = 1/2$  es *semientero*, siendo este tipo de valor una característica de las partículas denominadas **fermiones** (estadística de Fermi-Dirac). Esta característica fermiónica es especialmente importante cuando el interés se dirige a estudiar sistemas, como los átomos polielectrónicos o las moléculas, en los que más de un electrón están obligados a coexistir. En estos casos la función de onda que describe al conjunto de electrones debe necesariamente ser **antisimétrica**, y en su forma más sencilla toma la expresión del denominado *determinante de Slater*. Para un sistema de  $N$  electrones esta función matemática se escribe

$$\Psi(1,2,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \xi_1(\tau_1) & \xi_1(\tau_2) & \dots & \xi_1(\tau_N) \\ \xi_2(\tau_1) & \xi_2(\tau_2) & \dots & \xi_2(\tau_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \xi_N(\tau_1) & \xi_N(\tau_2) & \dots & \xi_N(\tau_N) \end{vmatrix} \quad (65)$$

en donde las coordenadas espaciales y de espín de cada electrón se representan por  $\tau_i$  ( $i=1,2,\dots,N$ ) y se utiliza un conjunto de  $N$  espín-orbitales  $\xi$  para describir al sistema. Como el desarrollo del determinante está compuesto por una suma algebraica de  $N!$  términos producto, cada uno de los cuáles contiene un elemento de cada fila y columna sin repetir ni fila ni columna y, además, estos términos van afectados de signo + ó - ( $N!/2$  de cada clase) dependiendo de la paridad de cada permutación implicada, se entiende el concepto de antisimetrización rápidamente: el intercambio de dos electrones (permutación de la columna 1 por la columna 2, por ejemplo) origina un cambio de

signo en la función (65). Esto no representa conceptualmente ningún problema, ya que el sentido físico probabilista está en el cuadrado de la función (65), magnitud que permanece inalterada bajo estas permutaciones. Siguiendo en esta línea, la ecuación (65) ilustra perfectamente el principio de exclusión de Pauli: dos electrones situados en el mismo estado cuántico darían una función de onda total para el sistema nula (el determinante tendría dos filas iguales), ese estado global está pues prohibido. Existen formas más complejas para la función de onda de sistemas polielectrónicos (Interacción de Configuraciones, Multi-Configuracionales), pero todas comparten este requisito de antisimetría frente al intercambio de electrones.

Nótese que todos los electrones son equivalentes, o en otros términos **indistinguibles**. El fundamento de este comportamiento de simetría está en el denominado Teorema de Conexión Espín-Estadística cuya primera formulación fue dada por Pauli en 1940. Otras partículas tienen espín entero o nulo, se denominan **bosones** y obedecen a la estadística de Bose-Einstein para la que este Teorema de Pauli exige funciones de onda simétricas con respecto al intercambio de partículas idénticas en un sistema (ejemplos de estas partículas son el helio-4, con espín nulo, y el fotón, que tiene espín 1). Es muy interesante señalar que si se considera un sistema ideal (sin interacciones) de fermiones, éstos se comportan como si existiera una repulsión neta entre ellos (pseudo-fuerza repulsiva). Por el contrario, un sistema ideal de bosones se comporta como si existiera una fuerza neta atractiva entre ellos (pseudo-fuerza atractiva). Conviene insistir de nuevo en el concepto de “indistinguibilidad (o indiscernibilidad)” entre partículas idénticas a escala microscópica, lo que representa un paso más allá del concepto “idénticas”: no hay manera de numerarlas para distinguir unas de otras.

Por otra parte, es muy curioso el hecho de que dada una función de onda de espín  $s = 1/2$  una rotación de  $\varphi = 360^\circ$  no la devuelve a ese mismo estado, sino a ese estado cambiado de signo (un cambio de fase cuántica). Es necesario dar “dos vueltas”, es decir girar  $\varphi = 720^\circ$  para recuperar la función de onda original (hay en la fase factores del tipo  $\exp(i\varphi/2) = \cos(\varphi/2) + i\text{sen}(\varphi/2)$  responsables de este cambio de signo). Desde el punto de vista del cálculo de propiedades convencionales para un sistema dado (dicho sin mucha precisión) estos cambios de signo no son importantes ya que no alteran la naturaleza física del problema, la cuál va ligada al cuadrado de la

función de onda. Sin embargo, este problema de la fase de la función de onda de un sistema de espines  $s = 1/2$  bajo rotaciones de  $360^\circ$  *si tiene repercusiones experimentales que pueden observarse en experimentos con haces de partículas.*<sup>xlv</sup> De esto se deduce que la función de onda es algo más que un intermedio útil para una fase del cálculo de propiedades a través de su cuadrado, y posee así ciertos elementos de realidad.<sup>xlv</sup> Consecuentemente, la validez de la Mecánica Cuántica (o la función de onda) no es un asunto estadístico, es decir algo que tiene sentido para representar el comportamiento medio de conjuntos grandes de partículas idénticas (más aún: indiscernibles), *sino que puede ser aplicada a una única partícula con absoluta fiabilidad y es de naturaleza probabilista.*

En la mayor parte de las aplicaciones en Química, para estudiar moléculas, los espín-orbitales  $\xi$  se construyen como el producto de una parte espacial  $\chi$ , que surge de resolver una ecuación de Schrödinger, por una parte de espín (convencionalmente suelen denotarse por  $\alpha$  y  $\beta$ ) directamente tomada del formalismo de Pauli

$$\xi_i(\tau_k) = \chi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) \times \alpha_k \quad \text{caso espín "arriba" (+1/2)} \quad (66a)$$

$$\xi_i(\tau_k) = \chi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) \times \beta_k \quad \text{caso espín "abajo" (-1/2)} \quad (66b)$$

Pero, dado que la ecuación de Schrödinger sólo es exactamente resoluble en el caso del hidrógeno y los átomos hidrogenoides, ¿cómo se determinan las formas explícitas de las funciones  $\chi$ ? .....

No es este el lugar para entrar en estas interesantes cuestiones; baste decir aquí que los orbitales de los átomos hidrogenoides forman una base conceptual muy apropiada para construir los orbitales atómicos de átomos arbitrarios (por ejemplo, las reglas de "apantallamiento" de J. C. Slater [1933], etc.). En conexión con las aplicaciones de la Mecánica Cuántica a la Química sí hay que destacar al pionero más caracterizado de ellas, Linus Pauling. Este importante científico tomó como tarea el hacer accesibles las nuevas ideas cuánticas de funciones de onda y consideración de espines a la comunidad de los químicos, inexplicablemente siempre con una gran mayoría de componentes ligeramente estacionaria y reluctante a participar de estos avances matemáticos. En este empeño Pauli desarrolló poderosas ideas intuitivas sobre el concepto de enlace químico como es su teoría de la hibridación de orbitales (1928-

1931). Con ella se explican las geometrías moleculares mediante las combinaciones lineales de orbitales atómicos dentro de un mismo átomo (orbitales híbridos), dotadas de propiedades direccionales (hibridaciones  $sp^3$ ,  $sp^2$ ,  $sp$ ,  $sp^2d$ , etc.), y que enfrentadas a otros orbitales híbridos de otros átomos (con el máximo solapamiento) producen una representación matemática y geométrica de los enlaces en una molécula. J. C. Slater dio una forma más matemáticamente consistente (1931) a estas ideas de Pauling. Como precedente a estos desarrollos ya en 1927 W. Heitler y F. London habían propuesto un esquema inicial de ataque, la Teoría del Enlace de Valencia, al mundo molecular con su estudio de la molécula de hidrógeno. Pauling contribuyó al desarrollo de esta forma de entender la matemática cuántica de las moléculas y se enfrentó dialécticamente a la otra forma alternativa (aparentemente más sencilla pero menos visual) debida a Hund y Mulliken (1927-1928) la Teoría de Orbitales Moleculares. Ambas teorías están basadas en el denominado método variacional (optimización de funciones de onda de prueba para un problema) y dan resultados equivalentes. Estos dos enfoques han evolucionado grandemente con el correr de los años, si bien la segunda goza de una mayor popularidad entre los especialistas hoy día.

Hay una gran cantidad de interesantísimas preguntas y cuestiones a analizar dentro de la Mecánica Cuántica. Puede que el lector haya oído hablar del *principio de superposición de funciones* para definir estados arbitrarios, del “*colapso* de la función de onda en los procesos de medida”, de las correlaciones EPR (Einstein-Podolsky-Rosen, 1935) y la *no localidad*, del “gato de Schrödinger” (Schrödinger, 1935), de la interpretación de los “*muchos universos*” (Everett, 1957), de las teorías de “*variables ocultas*” (Bohm, 1952), de las “*desigualdades de Bell*” (Bell, 1964), de la *decoherencia* (Zeh, 1970), de los conceptos de *superfluididad* y *superconductividad*, de las *supersimetrías*, de los *quarks*, ... Y un excitante largo etcétera. Por el momento señalemos que todos estos interrogantes, puzzles y desarrollos han ido encontrado respuestas (¡y planteado nuevas preguntas!) dentro de la Mecánica Cuántica. En particular, la rama química de esta disciplina, la Química Cuántica, se ha convertido en una herramienta de ayuda muy apreciada por especialistas de otras áreas (Química Orgánica, Química Inorgánica, Física Estadística, Bioquímica, etc.) por su valor como elemento de predicción e interpretación de realidades experimentales ligadas al estudio de moléculas, bien individualmente, bien en pequeños agregados. Por otra parte, para estudiar sistemas compuestos por un gran número de partículas (del orden del número

de Avogadro) a temperaturas muy bajas, casos en los que deben tenerse en cuenta los efectos cuánticos del conjunto (la longitud de onda térmica de de Broglie de las partículas resulta ser mayor que la distancia media entre partículas, y además están los efectos derivados del espín), la Mecánica Cuántica se especializa en la denominada Mecánica Estadística Cuántica, disciplina que presta una atención adicional a los aspectos estadísticos derivados del gran número de partículas presentes. Con estas herramientas teóricas se ha obtenido una profunda comprensión de las propiedades de la constitución de la materia y del Universo.<sup>xlvi</sup> Pero esta tarea no está concluida; afortunadamente, queda aún mucho por hacer y por descubrir.<sup>xlvii</sup>

## E. APÉNDICES

### APÉNDICE 1

#### **La difusa barrera clásico-cuántica: Interferometría con moléculas complejas**

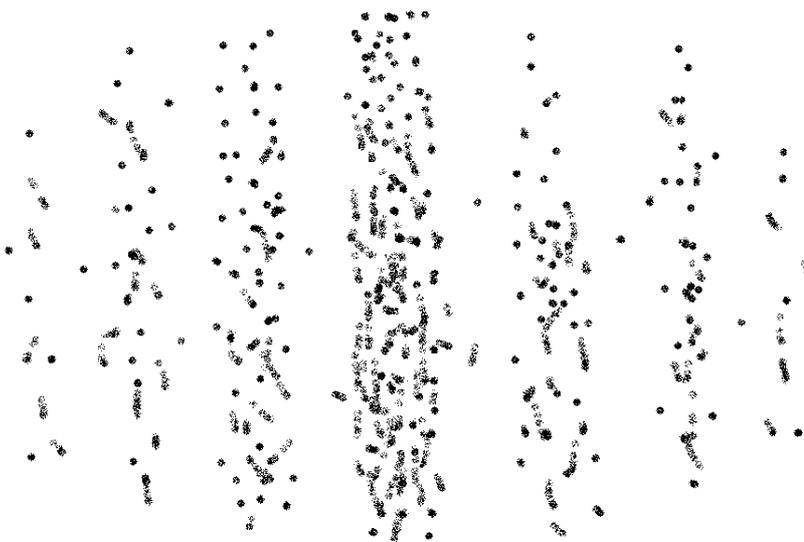
De todo lo dicho anteriormente queda claro que el comportamiento cuántico está asociado con partículas ligeras y con condiciones de bajas temperaturas y/o altas densidades. Los experimentos de difracción de electrones y de moléculas ligeras, como la de hidrógeno, avalan estas ideas. Por otra parte, también sabemos que a temperaturas suficientemente bajas (hoy se alcanzan temperaturas del orden de los  $10^{-8}$ - $10^{-9}$  K) cualquier partícula clásica (suficientemente pesada) manifestaría propiedades ondulatorias. Sin embargo, ningún objeto cotidiano presenta propiedades como las discutidas para el electrón de modo que podamos percibir las a simple vista.

¿Se puede delinear una clara frontera entre los comportamientos clásicos y cuánticos? Esta es una pregunta de la mayor trascendencia y con muchas vertientes para su análisis (véase el artículo de W. Zurek citado en la bibliografía), que puede ayudarnos a comprender mejor la naturaleza cuántica de la materia y, por ende, el comportamiento clásico. Como motivación, pregúntese el lector por la masa y las condiciones experimentales de temperatura para que un tipo de molécula suficientemente pesada pudiera dar un mapa de interferencia como el de los electrones. Guiándose de la intuición y con la molécula de hidrógeno como referente, uno razonaría cualitativamente que sería deseable una  $\lambda_B$  grande y con una separación entre aberturas del orden de tal  $\lambda_B$ , o incluso hasta de  $10\lambda_B$ , y....

No obstante, ¡sorpresa otra vez! Recientes experimentos de **interferometría molecular**, llevados a cabo por el grupo de A. Zeilinger en Viena (2002, 2003), indican que la difracción tiene lugar para condiciones mucho menos restrictivas. Así, moléculas grandes como el fullereno  $C_{70}$ , el fluorofullereno  $C_{60}F_{48}$ , y la biomolécula tetrafenilporfírina  $C_{44}H_{30}N_4$  dan efectos de interferencia cuántica a temperaturas ciertamente elevadas (del orden de los 600 K). Estos experimentos se realizan con un equipamiento muy sofisticado, en cámaras de alto vacío (presión base del orden de  $10^{-8}$  mbar;  $1 \text{ bar} = 1,02 \text{ kp/cm}^2 \cong 1 \text{ atm.}$ ), con rejillas de difracción y no con sólo dos aberturas, emitiéndose tales moléculas de una en una desde una cámara aneja de

sublimación (horno). Para hacerse una idea de lo que se analiza en estos experimentos citemos algunos de los datos suministrados por estos autores para el caso de la molécula de  $C_{70}$ : separación entre rejillas de definición 0,22 m; separación media entre aberturas (el periodo de la rejilla)  $d = 991 \text{ nm}$  ( $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ ); anchura de cada abertura  $a = 475,7 \text{ nm}$ ; y finalmente como valores de  $\lambda_B$  a estudiar se seleccionaron valores comprendidos entre 2,2 pm y 5,9 pm ( $1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$ ). Nótese que en la producción inicial de moléculas por sublimación éstas tienen una distribución de velocidades de Maxwell y no todas poseen la misma velocidad. La selección de moléculas adecuadas se efectuó con un dispositivo mecánico situado frente al orificio emisor del horno. Visto que  $\lambda_B \ll a \cong d/2$ , sobran los comentarios y sólo cabe la sorpresa. Más aún, si estos experimentos se ven confirmados en toda su dimensión, tendremos un nuevo problema. Las moléculas mencionadas tienen una geometría bien definida que puede medirse experimentalmente (por ejemplo, con técnicas de Rayos X), de modo que la difracción de la molécula como un todo nos hace preguntarnos por las características ondulatorias de tal geometría ( $\zeta?$ ),.... Por otra parte, las porfirinas son moléculas que forman la base del pigmento rojo de la sangre y del pigmento verde de las hojas, de modo que todo esto puede resultar de gran interés para la comprensión de las reacciones bioquímicas.... Fascinante, ¿no? ¡Y aún quedan los que creen que la aventura de la Ciencia Básica se ha acabado!

**FIGURA 15**



Forma típica de los impactos recibidos sobre la pantalla de detección en el experimento de las dos rendijas.

## APÉNDICE 2

### Premios Nobel citados

La mayoría de los científicos citados en este documento fueron galardonados con el Premio Nobel en Física o en Química. Estos Premios empezaron a concederse a partir de 1901.

- A.H. Lorentz y P. Zeeman**, Premio Nobel de Física en 1902
- H. A. Becquerel**, Premio Nobel de Física en 1903 (junto con P. y M. Curie)
- P. Lenard**, Premio Nobel de Física en 1905
- J.J. Thomson**, Premio Nobel de Física en 1906
- A. A. Michelson**, Premio Nobel de Física en 1907
- E. Rutherford**, Premio Nobel de Química en 1908
- M. Planck**, Premio Nobel de Física en 1918
- J. Stark**, Premio Nobel de Física en 1919
- A. Einstein**, Premio Nobel de Física en 1921
- N. Bohr**, Premio Nobel de Física en 1922
- R.A. Millikan**, Premio Nobel de Física en 1923
- J. Franck y G. Hertz**, Premio Nobel de Física en 1925
- J.B. Perrin**, Premio Nobel de Física en 1926
- A.H. Compton y C. T. R. Wilson**, Premio Nobel de Física en 1927
- L.V. de Broglie**, Premio Nobel de Física en 1929
- W. Heisenberg**, Premio Nobel de Física en 1932
- P.A.M. Dirac y E. Schrödinger**, Premio Nobel de Física en 1933
- H.C. Urey**, Premio Nobel de Química en 1934
- P.J.V. Debye**, Premio Nobel de Química en 1936
- C.J. Davisson y G.P. Thomson**, Premio Nobel de Física en 1937
- E. Fermi**, Premio Nobel de Física en 1938.
- O. Stern**, Premio Nobel de Física en 1943
- W. Pauli**, Premio Nobel de Física en 1945
- L. Pauling**, Premio Nobel de Química en 1954
- M. Born**, Premio Nobel de Física en 1954
- R.P. Feynman**, Premio Nobel de Física en 1965 (junto con J. S. Schwinger y S. Tomonaga)

## F. BIBLIOGRAFÍA

### *Sobre historia de la Ciencia*

- M. Born, The Born-Einstein letters 1916-1955, Macmillan, Nueva York (2005).
- M. Born, Einstein's theory of relativity, Dover, Nueva York (1962).
- M. y H. Born, Ciencia y conciencia en la era atómica, Alianza, Madrid (1971).
- L. J. Boya, Revista Española de Física, vol. **19**, pp. 60-62 (2005).
- O. R. Frisch, De la fisión del átomo a la bomba de hidrógeno, Alianza, Madrid (1982).
- A. Galindo, En recuerdo de Albert Einstein, Revista Española de Física, vol. **19**, pp. 2-3; Einstein y el tiempo, ibid. pp. 64-72 (2005).
- G. Gamow, Thirty years that shook physics, Dover, Nueva York (1985).
- G. Gamow, The great physicists from Galileo to Einstein, Dover, Nueva York (1988).
- J. Gribbin, En busca del gato de Schrödinger, Salvat, Barcelona (1986).
- W. Heisenberg, The physical principles of the quantum theory, Dover, Nueva York (1949).
- W. Heisenberg, Diálogos sobre la física atómica, Biblioteca de autores cristianos, Madrid (1972).
- W. Heisenberg, Más allá de la física, Biblioteca de autores cristianos, Madrid (1974).
- W. Heisenberg, Encuentros y conversaciones con Einstein y otros ensayos, Alianza, Madrid (1979).
- A. J. Ihde, The development of modern chemistry, Dover, Nueva York (1984).
- M. C. Izquierdo, F. Peral, M. A. Plaza y M. D. Troitiño, Evolución histórica de los principios de la Química, UNED, Madrid (2003).
- M. Jammer, The conceptual development of Quantum Mechanics, McGraw-Hill, Nueva York (1966).
- M. Jammer, Concepts of mass in classical and modern physics, Dover, Nueva York (1997).
- T. S. Kuhn, La teoría del cuerpo negro y la discontinuidad cuántica 1894-1912, Alianza, Madrid (1978).
- M. F. Perutz, Los científicos, la ciencia y la humanidad, Granica, Barcelona (2002)
- A. F. Rañada, Heisenberg, Ciencia, Incertidumbre y Conciencia, Nívola, Madrid (2005).
- J. M. Sánchez-Ron, El otro Einstein, Revista Española de Física, vol. **19**, pp. 58-63 (2005).
- L. M. Sesé, "Eferídes", *100cias@uned*, vol. **2**, pp. 78-80 (1999).
- L. M. Sesé, "La ley de las proporciones definidas de Proust", *100cias@uned*, vol. **3**, pp. 108-114 (2000).
- M. Yuste, "El experimento de Milikan", *100cias@uned*, vol. **2**, pp. 104-109 (1999).
- M. Yuste, "h/e: Planck, Einstein, Millikan, ...", *100cias@uned*, vol. **3**, pp. 114-118 (2000).

### Obras de consulta

- P. W. Atkins, *Physical Chemistry*, Oxford University Press, Oxford (1995).
- R. Balescu, *Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics*, Wiley, Nueva York (1975).
- J. S. Bell, *Lo decible y lo indecible en mecánica cuántica*, Alianza, Madrid (1990).
- P. A. M. Dirac, *The principles of quantum mechanics*, Clarendon, Oxford (1991).
- R. Eisberg y R. Resnick, *Física cuántica*, Limusa, Méjico (1978).
- M. Fernández y P. Rius, *Elementos de mecánica cuántica molecular*, Universidad de Cádiz, Cádiz (1998).
- R. P. Feynman, *el carácter de la ley física*, Editor A. Bosch, Barcelona (1983).
- R. P. Feynman, R. B. Leighton y M. Sands, *The Feynman lectures on physics*, Addison-Wesley, Reading (1963, 1964, 1965).
- A. Galindo y P. Pascual, *Mecánica cuántica*, Alhambra, Madrid (1978).
- G. Herzberg, *Atomic spectra and atomic structure*, Dover, Nueva York (1945).
- J. D. Jackson, *Electrodinámica Clásica*, Alhambra, Madrid (1966).
- L. D. Landau y E. Lifshitz, *Curso abreviado de física teórica (Mecánica Cuántica)*, Mir, Moscú (1979).
- P. Lorrain y D. R. Corson, *Campos y ondas electromagnéticos*, Selecciones Científicas, Madrid (1979).
- P. Mittlestaedt, *Problemas filosóficos de la física moderna*, Alhambra, Madrid (1969).
- R. Penrose, *The emperor's new mind*, Vintage, Londres (1989).
- H. Primas, *Chemistry, quantum mechanics and reductionism*, Springer-Verlag, Berlín (1981).
- H. Reichenbach, *Philosophical foundations of quantum mechanics*, University of California Press, Berkeley (1965).
- L. Schiff, *Quantum mechanics*, McGraw-Hill, Auckland (1981).
- M. H. Shamos, *Great experiments in physics*, Dover, Nueva York (1987).
- A. Szabo y N. S. Ostlund, *Modern quantum chemistry*, Dover, Nueva York (1996).
- G. L. Trigg, *Landmark experiments in twentieth century physics*, Dover, Nueva York (1995).
- J. A. Wheeler y W. H. Zurek, *Quantum theory and measurement*, Princeton, Nueva Jersey (1983).

### Referencias originales

- R. Bunsen y G. Kirchhoff, *Abh. Kgl. Acad. Wise. (Berlín)* (1861 y 1863).
- J. C. Maxwell, *A Treatise on Electricity and Magnetism (2 vol.)*, Oxford (1873).
- A. A. Michelson, *American Journal of Science*, vol. **22**, p. 20 (1981).
- A. A. Michelson y E. W. Morley, *American Journal of Science*, vol. **34**, p. 333 (1987); *Philosophical Magazine*, vol. **24**, p. 449 (1987).
- H. R. Hertz, *Sitzungsber d. Berlin Akademie der Wissenschaften*, Dic. 13 (1888); *Annalen der Physik*, vol. **36**, p. 769.
- E. C. Pickering, *Astrophysical Journal*, vol. **4**, p. 369 (1896); vol. **5**, p. 92. (1897).
- J. J. Thomson, *Philosophical Magazine*, vol. **44** (Series 5), p. 293 (1897).
- P. Zeeman, *Philosophical Magazine*, vol. **43**, p.226 (1897).

- M. Planck, *Annalen der Physik*, vol. **4**, p.553 (1901).
- P. Lenard, *Annalen der Physik*, vol. **8**, p.169 (1902).
- A. Einstein, *Annalen der Physik*, vol. **17**, p.144 (1905).
- A. Einstein, *Annalen der Physik*, vol. **17**, p.891 (1905).
- A. Einstein, *Annalen der Physik*, vol. **22**, p. 180 (1907).
- F. Paschen, *Annalen der Physik*, vol. **27**, p. 565 (1908).
- W. Ritz, *Physikalische Zeitschrift*, vol. **9**, p. 521 (1908).
- E. Rutherford, *Philosophical Magazine*, vol. **21**, p.669 (1911).
- R.A. Millikan, *Physical Review*, vol. **32**, p.349 (1911).
- P. Debye, *Annalen der Physik*, vol. **39**, p. 789 (1912).
- A. Fowler, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. **73**, Diciembre 1912.
- J. W. Nicholson, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. **72**, pp. 49, 139, 677, 693, 729 (1912).
- N. Bohr, *Philosophical Magazine*, vol. **26** (Series 6), p.1 (1913).
- J. Franck y G. Hertz, *Verh. Deut. Phys. Ges.*, vol. **16**, p.457, p.512 (1914).
- J. Ishiwara, *Tokyo Sugaku Buturigakawi Kizi*, vol. **8**, p.106 (1915).
- W. Wilson, *Philosophical Magazine*, vol. **29**, p.795 (1915).
- A. Sommerfeld, *Annalen der Physik*, vol. **51**, p.1, p.125 (1916).
- A. H. Compton, *Philosophical Magazine*, vol. **41**, p.749 (1921).
- W. Gerlach y O. Stern, *Zeitschrift für Physik*, vol. **9**, p.349 (1922).
- M. A. Catalán, *Philosophical Transactions of the Royal Society*. vol. **233A**, p. 127 (1922)
- L. de Broglie, *Comptes Rendus Academie des Sciences (Paris)*, vol. **177**, p.507, p. 509 (1923).
- A. H. Compton, *Physical Review*, vol. **21**, p.483, p. 715 (1923).
- A. H. Compton, *Physical Review*, vol. **22**, p.409 (1923).
- L. de Broglie, *Annals de Physique (Paris)*, vol. **3**, p. 22. (1925).
- W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik*, vol. **33**, p.879 (1925).
- M. Born, W. Heisenberg y P. Jordan, *Zeitschrift für Physik*, vol. **35**, p.557 (1925).
- W. Pauli, *Zeitschrift für Physik*, vol. **31**, p.765 (1925).
- G. E. Uhlenbeck y S. Goudsmit, *Naturwissenschaften*, vol. **13**, p. 953 (1925)
- E. Schrödinger, *Annalen der Physik*, vol. **79**, p.361, p.489 (1926).
- E. Schrödinger, *Annalen der Physik*, vol. **81**, p.109 (1926).
- E. Schrödinger, *Annalen der Physik*, vol. **79**, p.734 (1926).
- W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik*, vol. **38**, p. 411 (1926).
- M. Born, *Zeitschrift für Physik*, vol. **37**, p. 863 (1926).
- C. Eckart, *Physical Review*. vol. **28**, 711 (1926).
- M. Born, *Nature*, vol. **119**, p.354 (1927).
- W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik*, vol. **43**, p.172 (1927).
- C. Davisson y L. H. Germer, *Physical Review*, vol. **30**, p. 705 (1927).
- G. P. Thomson y A. Reid, *Nature*, vol. **119**, p.890 (1927).
- T. E. Phipps y J. B. Taylor, *Physical Review*, vol. **29**, 309 (1927).
- P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society (Londres)*, vol. **A 117**, p.610 (1928).
- P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society (Londres)*, vol. **A 123**, p.713 (1929).
- I. Estermann y O. Stern, *Zeitschrift für Physik*,. vol. **61**, p. 95 (1930).
- H. C. Urey, F. G. Brickwedde y G. M. Murphy, *Physical Review*, vol. **39**, p. 164 (1932).

- H. C. Urey, F. G. Brickwedde y G. M. Murphy, *Physical Review*, vol. **40**, p. 1 (1932).
- J. C. Slater y N. H. Frank, *Introduction to Theoretical Physics*, McGraw-Hill, New York (1933).
- W. Pauli y V. Weisskopf, *Helvetica Physica Acta* **7**, 709 (1934).
- A. Einstein, B. Podolsky y N. Rosen, *Physical Review*, vol. **47**, p.777 (1935).
- E. Schrödinger, *Die Naturwissenschaften*, vol. **23**, p. 807, p. 823, p. 844 (1935).
- R. P. Feynman, *Reviews of Modern Physics*, vol. **20**, p.367 (1948).
- D. Bohm, *Physical Review*, vol. **85**, p. 166, p. 180 (1952).
- H. Everett, *Reviews of Modern Physics*, vol. **29**, 454 (1957).
- J. S. Bell, *Physics*, vol. **1**, p. 195 (1964).
- C. Jönsson, *American Journal of Physics*, vol. **42**, p. 4 (1974) [traducción del artículo originalmente aparecido en *Zeitschrift für Physik*, vol. **161**, p. 454 (1961)].
- P. Holl, *Optik*, vol. **30**, p. 116 (1970).
- H. D. Zeh, *Foundations of Physics*, vol. **1**, p. 69 (1970).
- J. P. Martin y R. Speidel, *Optik*, vol. **36**, p.13 (1972).
- P. G. Merli, G. F. Missiroli and G. Pozzi, *American Journal of Physics*, vol. **44**, p. 306 (1976).
- A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki y H. Ezawa, *American Journal of Physics*, vol. **57**, p. 117 (1989).
- W. H. Zurek, *Physics Today*, October, p. 36 (1991).
- B. Brezger, L. Hackermüller, S. Uttenthaler, J. Petschinka, M. Arndt y A. Zeilinger, *Physical Review Letters*, vol. **88**, p. 100404 (2002).
- L. Hackermüller, S. Uttenthaler, K. Hornberger, E. Reiger, B. Brezger, A. Zeilinger y M. Arndt, *Physical Review Letters*, vol. **91**, p. 090408 (2003).

*Algunas páginas web especialmente interesantes:*

- <http://nobelprize.org>
- <http://www.lbl.gov/abc/wallchart/chapters/05/1.html>
- <http://www.nature.com/milestones/spin>

## G. CONSTANTES FÍSICAS FUNDAMENTALES Y FACTORES DE CONVERSIÓN

<i>Masa del electrón</i>	$m = 0.910953 \times 10^{-27} \text{ g}$
<i>Masa del protón</i>	$M_p = 1822.8880 m$
<i>Carga del electrón</i>	$e = 1.602177 \times 10^{-19} \text{ C}$
<i>Número de Avogadro</i>	$N_0 = 6.0221367 \times 10^{23} \text{ partículas/mol}$
<i>Constante de Boltzmann</i>	$k_B = 1.380658 \times 10^{-16} \text{ erg/K}$
<i>Constante de Planck</i>	$h = 6.6260755 \times 10^{-27} \text{ erg.s}$
<i>Velocidad de la luz</i>	$c = 2.99792458 \times 10^{10} \text{ cm/s}$
<i>Electrón-voltio</i>	$eV = 1.602177 \times 10^{-12} \text{ erg} = 23.06035 \text{ kcal/mol}$
<i>1 caloría</i>	$= 4.184 \text{ jul}$
<i>1 Hartree (u.a. energía)</i>	$= 627.5095 \text{ kcal/mol} = \text{unidad de energía atómica.}$
<i>1 Ångstrom (Å)</i>	$= 10^{-8} \text{ cm}$
<i>1 nanometro (nm)</i>	$= 10^{-9} \text{ m}$
<i>1 picometro (pm)</i>	$= 10^{-12} \text{ m}$
<i>1 Bohr</i>	$= 0.529177249 \text{ Å}$

### Unidades del sistema uem:

<i>Carga</i>	$= 10 \text{ C} = 2.9979 \times 10^{10} \text{ uee}$
<i>Longitud</i>	$= 1 \text{ cm.}$
<i>Masa</i>	$= 1 \text{ g.}$
<i>Tiempo</i>	$= 1 \text{ s.}$

## H. ACTIVIDADES RECOMENDADAS

1. En su artículo original Thomson denotaba las intensidades de los campos eléctrico y magnético por las letras F y H respectivamente. En la notación moderna estas magnitudes se designan por E y B, en tanto que F y H quedan reservadas para otras variables electromagnéticas. Consultar bibliografía sobre este tema (por ejemplo, el texto de Lorrain y Corson) y analizar el significado de cada uno de estos símbolos.

2. Comparar los mecanismos de emisión de electrones por el cátodo en los experimentos de los tubos de rayos catódicos y del efecto fotoeléctrico.

3. En una realización del experimento de Millikan se observa que una gota de aceite desciende una distancia de 15 mm en un tiempo de 31 segundos cuando el campo eléctrico exterior está desconectado. ¿Qué carga adquiere dicha gota si se mantiene en reposo cuando el campo eléctrico alcanza el valor de  $3 \times 10^3$  N/C? *Discutir el resultado.*

**Datos:** viscosidad del aire=  $180 \times 10^{-7}$  N.s/m<sup>2</sup>; densidad del aire= 1,29 Kg/m<sup>3</sup>; densidad del aceite= 824 Kg/m<sup>3</sup>. N= Newton, C=culombio.

4. Un gran éxito de Rutherford fue la identificación de las partículas alfa como núcleos de helio. Proponer algún experimento que sirva para identificar de manera inequívoca a las partículas alfa.

5. Comparar la fuerza de repulsión electrostática con la de atracción gravitatoria entre una partícula alfa y un núcleo de oro situados a distancias (en cm):  $10^{-5}$ ,  $10^{-6}$ ,  $10^{-7}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-9}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-11}$ . (Dar la comparación en forma de gráfico y comentarlo).  
Dato: constante de gravitación  $G=6,67 \times 10^{-11}$  N.m<sup>2</sup>/Kg<sup>2</sup>.

6. Señalar las analogías y diferencias entre los modelos atómicos de Rutherford y de Bohr.

7. Calcular el radio y la velocidad del electrón del átomo de hidrógeno en la primera órbita de Bohr. Comparar la velocidad calculada con la de la luz y decidir si las correcciones relativistas serán importantes. Para ello, evalúese el factor

$$f_{rel} = \left( 1 - \frac{v_1^2}{c^2} \right)^{1/2}$$

que caracteriza los efectos relativistas como más importantes cuánto más alejado esté de la unidad. ¿Qué se espera que suceda con estos efectos al aumentar el número cuántico  $n$ ?

8. Expresar las líneas del espectro del hidrógeno recogidas en la figura 7 en s<sup>-1</sup>, cm<sup>-1</sup> y ergios. ¿Con qué frecuencia habría que iluminar un átomo de hidrógeno, con su electrón en su estado más estable, para ionizarlo? Repárese en que las energías de las órbitas de Bohr (“estados ligados”) son negativas, y tanto más cuanto más estable es la órbita. ¿Qué sucede con las energías de los estados a medida que crece el número cuántico  $n$ ?

9. Calcular la longitud de onda de de Broglie del electrón del átomo de hidrógeno según el modelo de Bohr en la órbita  $n=1$ . Lo mismo para un átomo de Ar a una temperatura de 140 K y para un objeto de 70 Kg. que se mueve a una velocidad de 120 Km/h.

10. Hay que insistir en que el experimento de Feynman de las dos aberturas tal y como se muestra en el video es un experimento ideal, es decir, nunca se ha llevado a cabo de la forma expuesta (reléanse las observaciones hechas en el texto). Los experimentos clásicos de 1927 involucraban las rejillas de difracción constituidas por láminas cristalinas con muchos huecos interatómicos, y no dos aberturas aisladas, lo que hace que los mapas de difracción (interferencia) estén compuestos de anillos circulares. El mapa de interferencia con anillos del video se corresponde con una imagen aproximada de uno de estos experimentos reales de difracción de electrones. Buscar en la bibliografía recomendada (Atkins; Eisberg y Resnick), o en otra a la se tenga acceso, información experimental sobre mapas de difracción de electrones. Se verá que estos mapas son objetos que poseen una interpretación bastante compleja. Por otra parte, los experimentos posteriores mencionados en esta Guía, y que se realizaron desde 1961 en adelante, demostraron que este experimento con electrones y aberturas era posible. Consultar estas referencias y observar la forma de los mapas de interferencia que surgen para los casos de interferometría electrónica.

11. Describir el resultado del experimento de las dos aberturas en el caso de que cuando los detectores estén en funcionamiento una fracción apreciable de electrones, digamos de un 30%, escape a la detección. Hágase una representación plana aproximada del nuevo mapa de impactos en esta situación ideal suponiendo que la perturbación en las trayectorias es muy débil. Igualmente, reflexiónese sobre el mismo problema si se tiene una perturbación no despreciable.

12. Reflexiónese, igualmente, sobre la influencia del tamaño y de la separación de las aberturas, por un lado, y de la distancia entre las aberturas y la pantalla de detección, por otro, en el resultado del mapa de interferencia. En particular, si estos experimentos con electrones se trasladaran al dominio de la interferometría óptica (con luz), ¿cómo se modificarían las dimensiones relevantes del equipamiento experimental? (Consúltense las referencias de interferometría desde 1961 en adelante dadas en esta Guía)

13. Explicar el sentido que posee decir que los resultados del experimento de las dos aberturas son independientes del hecho de que los electrones se lancen espaciadamente de uno en uno. Repárese en el hecho de que si se lanzara un electrón únicamente en todo el experimento, éste impactaría sólo en un lugar concreto “no prohibido” de la pantalla. ¿Es posible físicamente emitir electrones desde una fuente espaciadamente de uno en uno?

14. Discutir la forma real del mapa aproximado de impactos que se obtendría realmente en el experimento de Feynman con las dos aberturas circulares mostrado en el video.

15. Expresar la densidad de probabilidad asociada a un experimento de difracción de electrones con tres rendijas. Identificar los términos responsables del fenómeno de la interferencia.

16. Todos sabemos que una velocidad posee dimensiones de longitud×(tiempo)<sup>-1</sup> o que una fuerza las tiene de masa×longitud×(tiempo)<sup>-2</sup>. ¿Tiene dimensiones una función de onda como la escrita en la ecuación (50)?

17. Una práctica habitual en la bibliografía especializada en estos temas consiste en escribir las ecuaciones tomando como la unidad determinadas constantes fundamentales, por ejemplo  $\hbar = m = e = 1$  (unidades atómicas u.a.). Esto obliga a saber muy bien lo que se hace en cada momento para poder recuperar al final la respuesta físicamente significativa. En esta Guía para todas las ecuaciones que involucran cargas eléctricas se ha optado por una notación que resultando cómoda muestre con claridad toda la física subyacente. El lector debe identificar el sistema de unidades utilizado en cada caso y ser capaz de escribir las ecuaciones en otros sistemas de unidades.

## I. NOTAS A LOS EPÍGRAFES

---

<sup>i</sup> Hay que decir, no obstante, que la Teoría de la Relatividad Especial jugó un papel muy importante en la comprensión de la realidad cuántica como veremos someramente en algunos lugares de esta Guía.

<sup>ii</sup> Esta definición se atribuye a L. Brillouin, pero posiblemente se hizo popular desde que W.M. Miller la incorporó a su fantástica novela de ciencia-ficción “A Canticle for Leibowitz” (1959).

<sup>iii</sup> Basándose en experimentos previos realizados por L. Galvani (publicados en 1791), A. Volta investigó la producción de efectos eléctricos por contacto entre discos de metales diferentes (1794) y por contacto entre metales y líquidos. El diagrama de la primera “pila” de Volta fue publicado en 1800. El uso de este tipo de dispositivo originó los primeros experimentos electroquímicos realizados por W. Nicholson y A Carlisle (1800) y los más sistemáticos de H. Davy, que publicó a partir de 1806. Muchos otros investigadores, como J. Berzelius, se vieron atraídos por la electroquímica ya que podía utilizarse, como había probado Davy, para obtener metales por electrolisis de sus sales. Todo este trabajo desembocó en la formulación de las leyes electroquímicas por M. Faraday (1832, 1834). En un intento de visualizar estas leyes electroquímicas H. von Helmholtz propuso en 1881 la idea de que las cargas eléctricas deberían presentarse en cantidades muy pequeñas e indivisibles.

<sup>iv</sup> La física pre-relativista postulaba la existencia del éter, un medio en el que la luz (radiación electromagnética) debería propagarse. A pesar de los resultados de Michelson y Morley y aunque en 1905 A. Einstein formuló la Teoría de la Relatividad Especial, eliminando así definitivamente la necesidad de recurrir al éter como el “portador” del campo electromagnético, los errores experimentales de aquella época llevaron a algunos científicos a no rechazar el concepto de éter. Fueron necesarias varias décadas de trabajo aumentando la precisión de las mediciones experimentales para convencer a los escépticos. Puede decirse que hacia mediados de la década de 1950 este asunto quedó zanjado. Experimentos recientes utilizando avanzada tecnología láser (grosso modo errores de una parte en mil millones) no han hecho sino confirmar tanto la temprana interpretación de Michelson y Morley como los geniales razonamientos de Einstein.

<sup>v</sup> Thomson en su artículo habla de fosforescencia. Véase un texto de Química Física para entender las diferencias entre fosforescencia y fluorescencia.

<sup>vi</sup> Para denotar las intensidades de los campos eléctrico y magnético Thomson utilizó las letras F y H respectivamente. En la notación moderna se utilizan, en el mismo orden, las letras E y B (inducción magnética). El símbolo H se reserva para designar lo que se denomina “campo magnético” H. En el vacío B y H son esencialmente la misma magnitud.

<sup>vii</sup> Las primeras pruebas de Hertz involucraban una placa de zinc. La emisión de electrones se observó también en filamentos calientes de metal o carbón.

<sup>viii</sup> En su lápida está grabada la letra *h* y el valor que él dedujo para esta constante ( $6.55 \times 10^{-27}$  erg. s). Estas grabaciones resultaron ser una costumbre (recuérdese el caso de Boltzmann) que se extendió en el tiempo, como lo prueba el caso de P. Dirac (ver más adelante).

<sup>ix</sup> Otra brillante aplicación que hizo Einstein de la hipótesis de Planck fue con su teoría de los calores específicos de los sólidos a bajas temperaturas (1907). Aunque esta teoría adolecía de varias dificultades, abrió el camino para la (salvo detalles) correcta formulación que dio P. Debye posteriormente (1912).

<sup>x</sup> Esta denominación se atribuye a G. N. Lewis (1926).

<sup>xi</sup> Es interesante señalar que en 1953 la Comisión Conjunta para la Espectroscopia recomendó que la unidad del número de ondas  $\text{cm}^{-1}$  fuera denominada “*kayser*” y se designase mediante la letra K.

---

Esta nomenclatura no gozó de aceptación y no se encuentra en los escritos científicos actuales. Hoy K sirve para denotar la unidad de temperatura absoluta, el Kelvin.

<sup>xii</sup> Son notables los intentos de defender el concepto electromagnético de la masa en el cambio de siglo del XIX al XX. En este empeño, que resultó fallido, destacó el fervoroso M. Abraham.

<sup>xiii</sup> Este tipo de idea estaba presente en la teoría del electrón rígido de M Abraham (1903) y también en la teoría del electrón de H. Lorentz (1892, 1904). En la última, el electrón en movimiento pasaba de ser una esfera a un esferoide de revolución achatado. Además, aunque la teoría de Lorentz estaba aún basada en la noción de éter, su conexión con la de la relatividad iba a resultar muy significativa. El mismo Thomson se vió atraído por la idea de que la masa del electrón era de naturaleza electromagnética (1907), según la cuál el electrón era un campo eléctrico ligado a algún tipo de origen “sin masa”. Con esta idea utilizó tres métodos diferentes para fijar el número de electrones que contenía un átomo. Sus resultados, aunque alejados de la realidad, pueden verse como un primer intento de determinación del número atómico y también como precursores de las futuras Teorías de Campo.

<sup>xiv</sup> La escuela positivista vienesa mantenía todavía una postura de extremo rechazo ante la idea de la existencia real de átomos y moléculas. Recuérdese el triste episodio del suicidio de L. Boltzmann ya mencionado.

<sup>xv</sup> Algunos autores como G. Gamow se hacen eco de la opinión de que en la fórmula de dispersión de Rutherford fue obtenido por quien luego sería su futuro yerno, el físico-matemático R. H. Fowler que realizó una brillante carrera en el campo de la mecánica estadística.

<sup>xvi</sup> El concepto de número atómico  $Z_N$ , como el número de protones (cargas positivas unidad) contenidos en el núcleo, fue clarificado poco después del hallazgo de Rutherford por H. Moseley con sus experimentos de bombardeo de elementos químicos con Rayos X (1913-1914). Se sabía que los protones eran núcleos de hidrógeno, pero la situación para átomos más pesados era incierta. Del bombardeo con partículas alfa sobre átomos de nitrógeno obtuvo Rutherford (1919) la primera transmutación atómica, resultando de tales choques la producción de protones pero su naturaleza no estaba clara. Pocos años después P. Blackett y W. Harkins (1925) independientemente demostraron la existencia como tales de los protones dentro de los núcleos atómicos utilizando la reacción de choque anterior. El problema de la masa atómica (esencialmente la del núcleo) tuvo que esperar hasta el descubrimiento del neutrón por J. Chadwick en 1932.

<sup>xvii</sup> En 1886 A. A. Michelson and E. W. Morley observaron que la estructura del espectro del hidrógeno era más complicada por contener líneas dobles (muy próximas). La explicación de este hecho tuvo que esperar algunos años hasta el descubrimiento del concepto de espín en 1925 en el que intervinieron W. Pauli, G. Uhlenbeck y S. Goudsmit.

<sup>xviii</sup> La fórmula generalizada de Ritz se obtiene reemplazando en la fórmula de Rydberg (24)  $n_f$  y  $n_i$  por sus respectivos desarrollos en series especiales de potencias:

$$n_f \rightarrow n_f + a_1 + b_1/n_f^2 + c_1/n_f^4 + d_1/n_f^6 + \dots;$$

$$n_i \rightarrow n_i + a_2 + b_2/n_i^2 + c_2/n_i^4 + d_2/n_i^6 + \dots$$

Existen otras expresiones que generalizan la fórmula (24), como la de Hicks o la de Shenstone, propuestas en la década de 1930. Estas expresiones junto con una sucinta explicación pueden encontrarse en “*Fundamental Formulas of Physics*”, vol 2 (editor D. H. Menzel), Dover, Nueva York (1960).

<sup>xix</sup> No se hizo ningún intento de explicar la estructura doblete de las líneas en este momento.

<sup>xx</sup> Los astrónomos habían observado que en el espectro de emisión de  $\zeta$  Puppis había una serie “semi-Balmer”:  $2 \frac{1}{2} \rightarrow 2, 3 \rightarrow 2, 3 \frac{1}{2} \rightarrow 2, \dots$

---

<sup>xxi</sup> Otra prueba de la agudeza de Bohr está en el descubrimiento del hafnio (elemento con número atómico 72 y cuyo nombre se deriva del antiguo nombre de Copenhague), realizado por G. von Hevesy y D. Coster en 1923. Los intentos de otros investigadores basados en que era una tierra rara y por tanto que debería ser trivalente, no condujeron a ninguna identificación positiva. Utilizando su modelo cuántico Bohr postuló que el hafnio debería ser tetravalente y no pertenecer a las tierras raras, sino que debería estar asociado con el ya conocido circonio. Bohr hizo saber esto a su colaborador Von Hevesy y el hafnio fue encontrado entre minerales de circonio. von Hevesy acabó siendo el pionero del uso de isótopos como trazadores en procesos químicos y en problemas clínicos (1934).

<sup>xxii</sup> En estas colisiones se conserva el momento lineal total del sistema, pero no la energía cinética total pues parte se transforma en energía interna de excitación del átomo.

<sup>xxiii</sup> Este nuevo modelo estaba fuertemente influenciado por la segunda teoría del cuerpo negro desarrollada por Planck (1906-1912), en la que pretendía reconciliar la inevitable discontinuidad en la energía con una vuelta al mundo clásico. En ella la constante  $h$  jugaba un papel fundamental para definir el tamaño de las “celdillas unidad” del espacio fásico clásico. Esta revisión de Planck no resultó viable como se demostró con los espectros atómicos y moleculares, que indicaban la existencia de niveles discretos de energía, y hacia 1922 a raíz del experimento de Stern-Gerlach (cuantización del espín) fue completamente abandonada.

<sup>xxiv</sup> El efecto isotópico es una de las causas del desdoblamiento hiperfino en los espectros atómicos y no resulta suficiente en muchos casos para explicar este tipo de estructura en las líneas espectrales. Para una explicación completa hay que recurrir a los efectos derivados del espín nuclear, como se verá más adelante. Los efectos nucleares fueron sugeridos por W. Pauli en 1924 como los causantes de la estructura hiperfina.

<sup>xxv</sup> Los rayos X se denominaron así (una incógnita) debido a que su naturaleza le resultó desconocida a su descubridor W. K. Röntgen (1895).

<sup>xxvi</sup> En 1925 A. Compton y A. Simon comprobaron que este tipo de efecto se da también por choque entre un fotón de rayos X y un electrón perteneciente a una molécula. Esto lo comprobaron haciendo pasar rayos X a través de vapor de agua supersaturado, observando un producto secundario adicional (fotoelectrones) resultantes del choque entre la radiación principal y una nueva molécula de agua.

<sup>xxvii</sup> En una colisión elástica se conservan tanto el impulso lineal total como la energía cinética total del sistema. Esto no impide que, en general, haya transferencias de momento y de energía cinética entre las partículas que chocan. Para un medio dispersor con espesor muy pequeño esta aproximación de choque uno-a-uno es correcta.

<sup>xxviii</sup> La cámara de niebla de Wilson (1911) permitió inicialmente fotografiar las trayectorias de las partículas  $\alpha$  (núcleos de helio) y  $\beta$  (electrones), emitidas en la desintegración de sustancias radiactivas, al hacerlas pasar a través de vapor de agua supersaturado. Al paso de estas partículas diminutas gotas de agua condensaban en forma de líneas prácticamente rectas para las partículas  $\alpha$  y en forma de curvas irregulares para las  $\beta$ .

<sup>xxix</sup> Otros investigadores, como H. Kikuchi y A. Rupp, corroboraron la difracción de electrones en 1928.

<sup>xxx</sup> Stern perfeccionó el método de producción de haces moleculares descubierto previamente por L. Dunoyer (1911) y lo convirtió en una poderosa herramienta para la investigación de las propiedades magnéticas de átomos y moléculas. Véase la sección 14 más adelante, en particular la parte dedicada al espín y momento magnético.

<sup>xxxi</sup> Un precedente análogo a estos experimentos teóricos con electrones puede verse ya en la contribución de N. Bohr a un volumen dedicado a A. Einstein publicado en 1949 “Albert Einstein:

---

Philosopher- Scientist”, editado por P. A. Schilpp, p. 200, The Library of Living Philosophers (Evanston).

<sup>xxxii</sup> Analizadas separadamente cada una de ellas mostraría un cierto grado de asimetría, pero las distancias pueden ajustarse para que el resultado final al combinar las dos sea simétrico con respecto a la línea que une la abertura en la fuente emisora y el centro del par de aberturas en la pared.

<sup>xxxiii</sup> La primera ecuación de ondas que inventó Schrödinger involucraba la segunda derivada temporal (ver la sección siguiente para la relación de esta ecuación inicial con los mesones  $\pi$ ).

<sup>xxxiv</sup> Otra Conferencia Solvay dedicada a los núcleos atómicos tuvo lugar en 1935, pero Einstein no participó en ella.

<sup>xxxv</sup> Born propuso esta interpretación para explicar procesos de colisión utilizando la teoría recientemente propuesta por Schrödinger. Curiosamente la dio en un par de líneas añadidas en las pruebas de imprenta del artículo original Su importante contribución a la clarificación del problema fue el abandono del espacio físico a favor del espacio configuracional del sistema (la parte del espacio físico definida únicamente por las coordenadas de las partículas). De ondas en el espacio físico se pasó a ondas y probabilidades en el espacio configuracional asociado a cada sistema. Esta interpretación es una de las bases de la conocida como interpretación de Copenhague de la Mecánica Cuántica, que fue abanderada por N. Bohr, W. Heisenberg y J. von Neumann. Esta interpretación proporciona un esquema práctico para la aplicación de los conceptos y la realización de predicciones comprobables experimentalmente. A pesar de su éxito, la interpretación de Copenhague tuvo y tiene sus detractores, no por su utilidad que es incuestionable, sino por sus aparentes “defectos de completitud” como descripción de los fenómenos naturales (ver nota siguiente).

<sup>xxxvi</sup> El lector estaría en buena compañía. Einstein, Schrödinger, de Broglie y otros muchos científicos se hicieron este tipo de preguntas. Todo ello les llevó a cuestionarse la completitud de la Mecánica Cuántica (no su utilidad), en el sentido de que debería faltar algo. Después de ellos, y en esta línea de pensamiento, ha habido intentos de construir alternativas a la Mecánica Cuántica, como las teorías de variables ocultas, pero se han demostrado inconsistentes. Lo que se sabe hoy es que la Mecánica Cuántica conduce a predicciones que se han visto siempre confirmadas por la realidad experimental. Los problemas de interpretación que plantea la Mecánica Cuántica para ser entendidos en términos de nuestra experiencia cotidiana, o sentido común, parecen ser insolubles. El experimento de las dos rendijas es una buena ilustración de esto, a fin de cuentas el electrón posee masa y carga, ... Tal vez, en esta disyuntiva sea conveniente parafrasear a nuestro Santiago Ramón y Cajal y decir que la ciencia explica los cómo, pues los porqués son objeto de otras disciplinas o saberes.

<sup>xxxvii</sup> Un caso especial es el par ángulo-impulso angular conjugado para el que una relación del tipo (56)-(58) no es, en general, exacta, sino sólo aproximada.

<sup>xxxviii</sup> De las discusiones Bohr-Einstein durante la Conferencia Solvay de 1930 se obtuvo una visión más completa de la relación (59). La cuestión suscitada por Einstein fue resuelta por Bohr utilizando argumentos relativistas, la conclusión de los cuáles fue la relación de indeterminación energía-tiempo.

<sup>xxxix</sup> Las relaciones de indeterminación dentro del dominio relativista no mantienen la forma de las relaciones (56)-(59).

<sup>xl</sup> Otro éxito indiscutible de la ecuación de Dirac fue la predicción del positrón (partícula de antimateria), si bien Dirac no llegó a identificar esta posibilidad, hecho del que se lamentaría tiempo después. Esta partícula fue descubierta por C. Anderson en 1932. Al modo de lo hecho años antes con Boltzmann y Planck, hay en la Abadía de Westminster (Londres) una lápida en la que a la par que el nombre de Dirac figura su ecuación.

---

<sup>xli</sup> Esto incluye al protón, al neutrón, y a todos los quarks y leptones que construyen la materia.

<sup>xlii</sup> Además de todos los logros reseñados con anterioridad con relación a Stern, éste, I. Estermann y O. Frisch obtuvieron una primera medida significativa del momento magnético del protón (1933) utilizando un aparato esencialmente idéntico al del experimento de Stern-Gerlach.

<sup>xliii</sup> Este tipo de desdoblamiento hiperfino en el átomo <sup>133</sup>Cs da origen a una transición desde el nivel de energía fundamental al primer nivel excitado cuya frecuencia es  $9.192.631.770 \text{ s}^{-1}$  (ciclos por segundo). El segundo como unidad de tiempo se define a partir de esta frecuencia. El reloj de cesio, como así se le denomina, está pues basado en un fenómeno cuántico que involucra a los espines del electrón *s* más externo (a su momento angular total, para ser exactos) y del núcleo.

<sup>xliv</sup> Esto se ha observado en experimentos con un haz de neutrones muy lentos preparados en un estado de espín prefijado. El haz se separa en dos haces, a uno de ellos se le somete a una rotación espacial de  $360^\circ$  y al otro se le deja como estaba. La recombinación de los dos haces lleva a un fenómeno de interferencia destructiva, ambos haces están fuera de fase, y no se observa señal en el detector que recoge ambos haces. Si la rotación al primer haz es de  $720^\circ$  entonces sí se observa en ese detector una señal muy intensa, correspondiente a que ambos haces están ahora en fase: el primer haz ha recuperado su estado inicial.

<sup>xlv</sup> Los problemas interpretativos sobre la Mecánica Cuántica forman parte de la historia de la Ciencia y no pueden darse por concluidos aún, a pesar de esta disciplina se acerca al centenario de su descubrimiento.

<sup>xlvi</sup> Por ejemplo, en la investigación de la distribución de materia en el espacio interestelar resulta especialmente interesante la señal de longitud de onda 21.2 cm, que está asociada con el desdoblamiento hiperfino en los átomos de hidrógeno (el elemento más abundante) debido al acoplamiento del momento angular total del electrón con el espín del núcleo de este elemento. Este acoplamiento da origen a cuatro estados, el fundamental y tres estados degenerados en energía por encima de aquél. La línea de 21 cm, como se la denomina normalmente, pertenece al rango de las ondas de radio y fue descubierta por H. Ewen y E. Purcell en 1951. Es muy útil para estudiar regiones que no son accesibles dentro del rango de las longitudes de onda ópticas.

<sup>xlvii</sup> Otro ejemplo sobresaliente es el del origen del Universo como resultado del famoso Big-Bang a partir de la radiación de fondo, que se interpreta en términos de la radiación de un cuerpo negro (la ley de Planck de 1900) en equilibrio a una temperatura  $T=2,73 \text{ K}$ . Este efecto fue primeramente observado por A. Penzias y R. Wilson entre 1964 y 1965 al detectar que del espacio exterior venía una radiación isotrópica de microondas cuya temperatura “de cuerpo negro” debía de ser del orden de los 3 K. Razonamientos teóricos de G. Gamow y colaboradores, R. Alpher y R. Herman, hacia finales de la década de 1940 indicaban que de haberse producido el Big-Bang la temperatura media del Universo debería ser en nuestros tiempos del orden de los 5 K. Todo ello les valió a Penzias y Wilson el Premio Nobel de Física en 1978, pero Gamow se quedó finalmente sin él. El último y muy preciso análisis de esta radiación de fondo ha arrojado el valor citado de 2.73 K y ha sido obtenido vía el análisis de datos recogidos por satélites de la NASA. Los científicos responsables de este análisis, J. Mather y G. Smoot, también recibieron el Premio Nobel de Física (2006).