

# Gerhard Herzberg: “Padre” de la Espectroscopia Molecular

Manuel Gil Criado

*Departamento de Química Física I. Facultad de Química.  
Universidad Complutense. 28040-Madrid*

*“The sole aim of science  
is the glory  
of the human spirit”.*

**Gerhard Herzberg**

Premio Nobel de Química, 1971

Nunca me ha gustado leer las notas necrológicas, ni leerlas ni mucho menos escribirlas. Esta puede ser mi disculpa por el retraso con el que escribo esta breve nota sobre la muerte, y sobre todo acerca de la vida y obra del Dr. Gerhard Herzberg. Ha transcurrido ya bastante más de un año desde su muerte, y es obligado el homenaje de aquellos que tenemos contraída una gran deuda con su obra, con su visión profunda y completa de la espectroscopia molecular por lo que es considerado por muchos como el “padre” de la misma, el representante más importante de este campo desde hace ya muchos años (1).

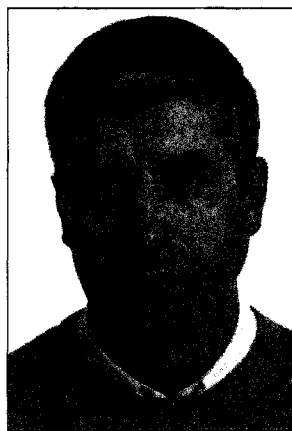
En la primavera del año pasado, hojeando rutinariamente el último número de la revista *Spectroscopy Europe* (2), en la sección de Noticias, tuve la primera información sobre su fallecimiento. Era una nota muy breve en la que se comunicaba el fallecimiento del Dr. G. Herzberg, a la edad de 94 años, en su casa de Ottawa, Canadá, y que me causó una profunda impresión. Su figura ha sido un hito permanente, una referencia fundamental, en mi carrera docente e investigadora, a pesar de no haber tenido el placer de conocerle personalmente durante

mi estancia en 1989 en el N.R.C.C. (*National Research Council of Canada*) en Halifax, Nova Scotia. En los últimos años el Dr. Herzberg, a pesar de su avanzada edad, acudía diariamente al “Instituto Herzberg de Astrofísica” del N.R.C.C. en Ottawa, que desde el año 1975 lleva su nombre.

Sus contribuciones en los campos de la física, la química y la astronomía han sido enormes y fundamentales para la comprensión de numerosos aspectos de su desarrollo actual. La innovación y la extensión de su obra en áreas de la espectroscopia atómica (3) y molecular (4,5,6,7,8) le han llevado a ser una referencia fiable en libros y artículos sobre temas de espectroscopia y estructura, tanto en estudios teóricos como en los trabajos aplicados más diversos.

## ETAPA ALEMANA: FORMACIÓN Y ESTUDIO

Gerhard Herzberg nació en la ciudad de Hamburgo el día de Navidad de 1904. Estudió Física de Ingenieros, una nueva carrera de la Universidad Técnica de Darmstadt (Alemania), entre 1924 y 1928. Los únicos antecedentes de estudios científicos en su familia fueron los de un hermano que estudió química y permaneció como *residente* (“resident chemist”) en una



Manuel Gil Criado

azucarera de Checoslovaquia, entonces Austria. En 1927 Herzberg obtuvo el Diploma de *Física de Ingenieros*, equivalente a una licenciatura en física, por la Escuela Técnica Superior de Darmstadt. Un año después consiguió el título de doctor en Ingeniería en la misma escuela superior y publicó 12 artículos sobre física atómica y molecular.

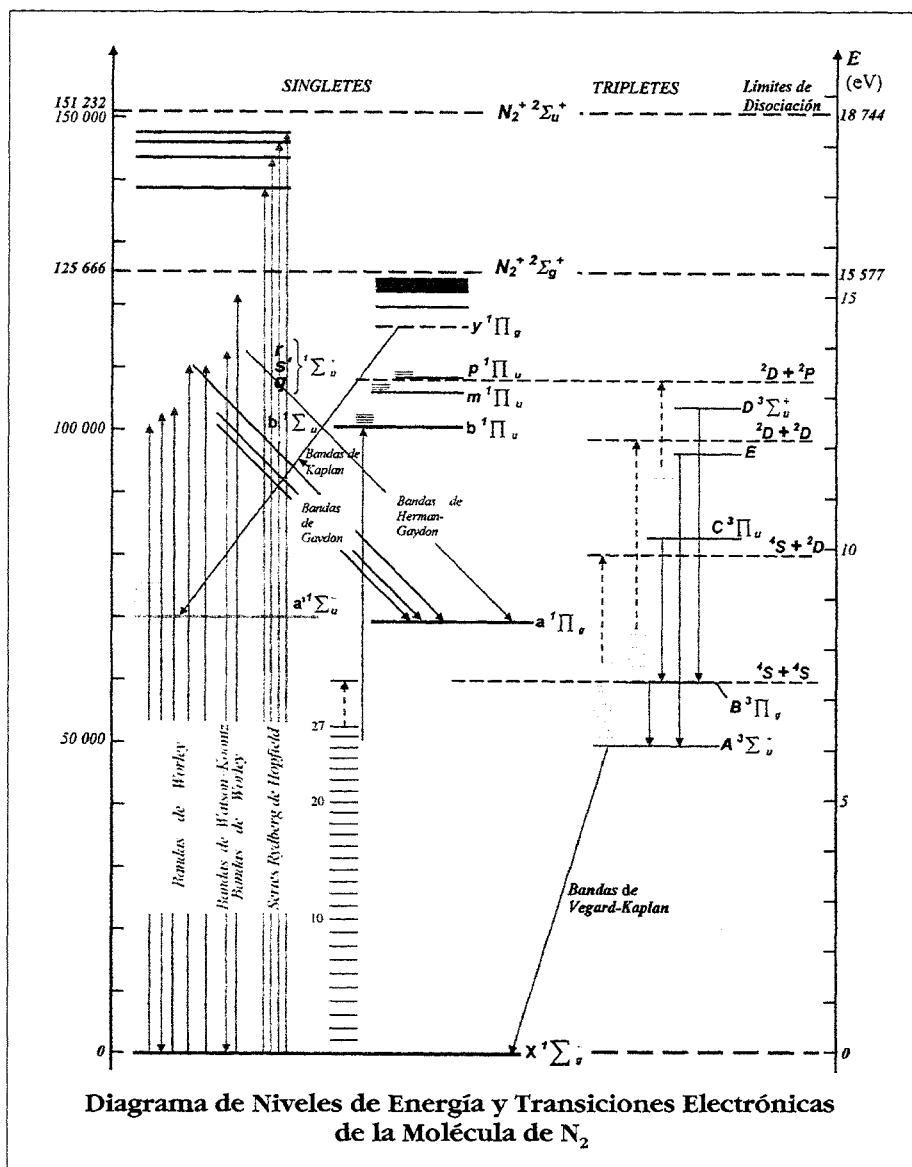
Durante los años 1928-1929 realizó estudios post-doctorales bajo la dirección del profesor Hans Rau del Departamento de Física de la Universidad de Darmstadt. Dichos estudios se llevaron a cabo en el Departamento de Física Teórica de Göttingen bajo la supervisión de James Franck y Max Born. Los estudios se completaron, desde finales de 1929 hasta 1930, en la Universidad de Bristol (Inglaterra) bajo la supervisión de J.E. Lennard-Jones, profesor de Física Teórica, investigando la estructura electrónica de moléculas diatómicas. Primero en una entrevista (9) y después en su autobiografía de 1985 (10), Gerhard Herzberg subrayaba que su iniciación en la investigación espectroscópica y de la estructura de la materia la había realizado con el profesor H. Rau. Este fue discípulo de Wilhelm Wien, que formuló la *Ley de Desplazamiento de Wien* para las líneas espectrales. Con el profesor Rau realizó el estudio de las bandas espectrales de diferentes

especies químicas de vida muy corta:  $\text{Li}^+$ ,  $\text{CN}$ ,  $\text{I}$ ,  $\text{N}_2^+$ , ... A finales del año 1929 G. Herzberg viajó de Bristol a Darmstadt para casarse con Luise Oettinger, entonces estudiante en la Universidad de Göttingen, y después espectroscopista y una excelente colaboradora en sus trabajos.

En 1930, después de su permanencia en la Universidad de Bristol con el profesor Lennard-Jones, obtuvo el nombramiento de "Privatdozent", equivalente a conferenciante y con capacidad de "venia legendi", en la Universidad Técnica de Darmstadt. Se trataba de un puesto que había solicitado en 1929, para el que tuvo que aportar su Tesis Doctoral y los trabajos post-doctorales realizados en Göttingen y Bristol. Debe destacarse que los estudios realizados en el Departamento de Física Teórica de la Universidad de Bristol dieron como fruto varias publicaciones sobre los espectros y estructura de las moléculas de  $\text{P}_2$ ,  $\text{CP}$ ,  $\text{H}_2\text{CO}$  (formaldehído) y  $\text{C}_2\text{H}_2$  (acetileno). El cargo de "Privatdozent" lo ejerció desde 1930 hasta 1935, año en el que es rescindido su contrato y se ve obligado a marcharse de Alemania. Durante 1930 mantuvo una breve pero fructífera colaboración con Walter H. Heitler, entonces ayudante de Max Born en la Universidad de Göttingen, sobre los espectros electrónicos y la estructura electrónica de diferentes especies de  $\text{N}_2$  (véase el diagrama de niveles de energía).

A partir de 1933 Herzberg repartía su tiempo entre su familia, las obligaciones de su cargo como "Privatdozent", sus trabajos de investigación y la elaboración de su primer libro: "Atomic Spectra and Atomic Structure" (Ref. 3). Inicialmente pensado como "Atomic and Molecular Spectra", lo cambió pronto de título al advertir que el manuscrito dedicado a espectroscopía atómica ocupaba un espacio mucho mayor que el previsto inicialmente. La obra, escrita en alemán, fue completada por Herzberg poco antes de salir de Alemania.

Las leyes nuevas, restrictivas en cuanto a las libertades individuales, y racistas dictadas por el Régimen Nazi



en 1933 hicieron pensar a la familia Herzberg que sus días en Alemania estaban contados. En efecto, algunas de estas leyes establecían la imposibilidad de enseñar en universidades alemanas para los casados con judíos, caso de Luise Oettinger, entonces Luise Herzberg. Todo ello superpuesto a un ambiente social y político asfixiante, coincidente con la creación de los primeros campos de concentración, llevó a G. Herzberg a preparar su salida de Alemania. El contrato de Herzberg con la Universidad Técnica de Darmstadt concluía en 1935, de manera que nada les ataba ya a permanecer allí. Únicamente había un "pequeño" problema: en ese momento entre él y su mujer Luise disponían de 20 marcos alemanes, equivalentes a unos 2,50 dólares americanos de la época.

Durante el verano de 1933 los Herzberg tuvieron su primer contacto con Canadá. Recibieron en su laboratorio de Darmstadt, durante un año, al joven químico físico John W.T. Spinks de la Universidad de Saskatchewan en Saskatoon (Canadá). El Dr. W.C. Murray, presidente de la Universidad de Saskatchewan, conecor a través del profesor Spinks de los problemas de los Herzberg, y su deseo de salir de Alemania, ofreció a G. Herzberg un puesto como *profesor invitado* y una beca de la Fundación Carnegie de Nueva York para él y Luise de dos años de duración, en calidad de refugiados. Después de algunas compras rápidas e indispensables de equipamiento personal y espectroscópico, ambos abandonaron Alemania el 16 de Agosto de 1935.

## ETAPA CANADIENSE: MADUREZ Y PUBLICACIONES

Un barco transportó a los Herzberg desde Hamburgo a Nueva York, puerto en el que fondearon el 22 de Agosto de 1935. Antes de iniciar su viaje a Canadá, G. Herzberg aprovechó para visitar algunas universidades norteamericanas, como la de Princeton en Nueva Jersey. Allí contactó y firmó un contrato con la editorial Prentice-Hall comprometiéndose a publicar en inglés el manuscrito de su libro sobre espectroscopía atómica (Ref. 3). A continuación se trasladaron por tren desde Chicago hasta Saskatoon vía Minneápolis-Winnipeg-Regina, es decir, a través de la línea "Trans-Canada Railway" que atraviesa Canadá desde Halifax hasta Vancouver-Victoria. Saskatoon, una ciudad de unos 40.000 habitantes (actualmente alrededor de 125.000), ofreció a los Herzberg una cálida recepción en el recinto de la Universidad, muy en consonancia con el carácter amable y acogedor de los canadienses.

Los primeros trabajos de investigación realizados por Herzberg en la Universidad de Saskatoon se hicieron con una instrumentación bastante deficiente: un espectrógrafo UV-Vis "Hilger" de resolución media. Sin embargo, muy pronto logró fondos, por un valor de mil quinientos dólares U.S.A., suministrados por la fundación *American Philosophical Society*, para la construcción de un espectrómetro de red, un tubo de acero de 50 centímetros de altura y 6 metros de longitud. El espectrómetro fue montado en su laboratorio con la ayuda de su técnico y excelente colaborador Jack Shoemith, lo que le permitió llevar a cabo estudios espectrales en condiciones de muy alta resolución. Con este instrumento Herzberg y Shoemith obtuvieron en 1959 el primer espectrograma del radical libre metileno,  $\bullet\text{CH}_2$ , cuya vida media muy corta dificultaba su identificación. En los 10 años de estancia en Saskatoon, además de sus publicaciones, su trabajo quedó plasmado en tres<sup>(4, 5, 6)</sup> de sus seis libros.

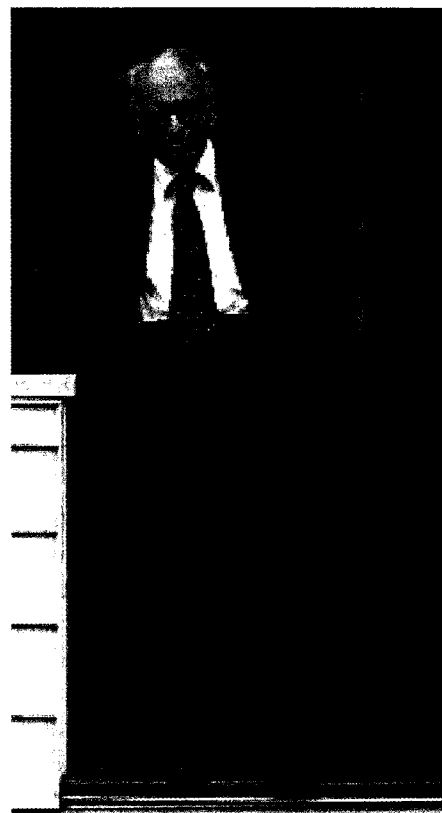
En 1940 asistió a una reunión científica en el recientemente renovado Observatorio de Yerkes en Chicago, presentando, ese año y el siguiente, trabajos sobre líneas estelares de las moléculas diatómicas (radicales) CH y CN. En 1943 el profesor O. Struve, director del Observatorio, hizo a Herzberg una propuesta para trabajar como profesor en el Laboratorio de Espectroscopía de la Universidad de Chicago, laboratorio asociado al Observatorio Yerkes. Sus deseos juveniles de convertirse en astrónomo, así como la posibilidad real de investigación en astrofísica en uno de los mejores laboratorios de la época resultó ser una combinación irresistible. En 1945 se trasladó desde Saskatoon con su familia, por entonces incrementada con sus hijos Paul y Agnes. En Yerkes cumplió su viejo sueño de ser astrónomo y realizó estudios espectrales de atmósferas planetarias y del espacio interestelar. Registró fotográficamente los espectros infrarrojos de  $\text{CO}_2$ ,  $\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$  y  $\text{CHF}_3$ , así como el espectro ultravioleta de  $\text{O}_2$ , cuyo estudio había comenzado en Darmstadt.

## EN EL N.R.C.C.: CONTINUIDAD INVESTIGADORA Y PREMIOS

A finales de 1947, Gerhard Herzberg recibió una oferta del N.R.C. de Canadá para poner en marcha un nuevo laboratorio de espectroscopía en Ottawa, ciudad a la que se trasladan los Herzberg en 1948. Fue nombrado "Principal Research Officer", nombramiento del máximo nivel en ese centro. El Dr. C.J. Mackenzie, presidente del Consejo de Canadá le ofreció poco después el cargo de Director de la División de Física, y después de algunas dudas acabó por aceptarlo. En el año 1955 la División de Física del Consejo canadiense se dividió en Física Pura y Aplicada, permaneciendo Herzberg como director de la División de Física Pura hasta 1969. En este año obtuvo el nombramiento de *Distinguished Research Scientist* dentro de la misma División de Física, nueva-

mente unificada, del N.R.C.C., cargo que tuvo hasta más allá de su jubilación.

En el N.R.C.C. Herzberg consiguió reunir un grupo de jóvenes espectroscopistas, canadienses y extranjeros, capaces de realizar estudios a muy alta resolución de ciertas moléculas, en particular numerosos radicales libres, en atmósferas planetarias, en cometas y en el espacio interestelar. Desde 1957 a 1963 fue Vicepresidente de la I.U.P.A.P. (Unión Internacional de Física Pura y Aplicada), Presidente de la Asociación de Físicos Canadienses durante 1956-57 y Presidente de la Real Sociedad de Canadá en 1966-67.



En 1971 el Dr. Herzberg obtuvo el Premio Nobel de Química en 1971 "... por sus contribuciones al conocimiento de la estructura electrónica y la geometría de las moléculas, en particular de los radicales libres." Pero su bagaje de premios y honores recibidos no comenzó ni acabó aquí. Desde 1950, año en que se le concedió la Medalla de la Universidad de Lieja, hasta el año 1987 en el que recibió la Medalla Memorial Jan Marcus Marci de la Sociedad de Espectroscopía Checoslovaca, han sido innumera-

bles las concesiones de premios y medallas. Pueden citarse, como algunas de las más destacables: Medalla de Oro de la Asociación Canadiense de Físicos en 1957, Medalla de la "Society for Applied Spectroscopy" (U.S.A.) en 1959, Medalla de la Universidad de Bruselas en 1960, el "Pittsburgh Spectroscopy Award" de la "Spectroscopy Society of Pittsburgh" en 1962, Medalla Frederic Ives de la "Optical Society of America" en 1964, Medalla Willard Gibbs de la "American Chemical Society" en 1969, Medalla Faraday en 1970 y la "Royal Medal" en 1971, ambas de la "Chemical Society of London", Medalla Linus Pauling de la "American Chemical Society" en 1971, Premio Madison Marshall de la "American Chemical Society (North Alabama Section)" en 1974, y Premio Earl K. Plyler de la "American Physical Society" en 1985. Desde el año 1987, el planeta menor conocido hasta entonces como **3316-1984 CN1**, fue designado oficialmente con el nombre de "Herzberg".

Como Herzberg ha reconocido en su autobiografía<sup>10</sup>, su permanencia en el N.R.C.C. le permitió prolongar durante años su trabajo espectroscópico, incluso después de jubilarse en el año 1995 a la edad de 90 años, espe-

cialmente gracias a la colaboración con miembros jóvenes del Laboratorio. Así, por ejemplo, su actividad investigadora en los años 80 le llevó al descubrimiento espectroscópico del hidrógeno triatómico, H<sub>3</sub>, por el que le fue otorgada en 1985 la prestigiosa Medalla de la "American Physical Society". Incluso en los últimos años de su vida continuó su producción científica<sup>(11)</sup> en temas tales como los espectros de las denominadas "moléculas de Rydberg"<sup>(12)</sup>, y los espectros complejos de enigmáticas "líneas interestelares difusas", conocidas por los astrónomos desde los años 30, pero sin que se hayan obtenido aún pruebas concretas de su identificación o reproducción en el laboratorio.

Durante la presentación de G. Herzberg a la Real Academia Sueca de Ciencias como Premio Nobel de Química en 1971, el profesor Stig Claesson le destacó como "el espectroscopista molecular más famoso del mundo", y a su Instituto de Ottawa como "el centro indiscutible para dicha investigación", añadiendo que "las únicas instituciones que previamente jugaron dicho papel fueron el laboratorio Cavendish en Cambridge y el instituto de Bohr en Copenhagen". La posición destacada del Dr. Herzberg

dentro de la División de Física consiguió el reconocimiento de la investigación de primera línea que se estaba realizando en el N.R.C. de Canadá dentro del campo de la espectroscopía, papel de liderazgo que continúa en la actualidad. De hecho, numerosos investigadores que han pasado por el N.R.C.C., entre los que se encuentra el segundo Premio Nobel de Química de Canadá (1986) John Polanyi, ha conseguido el reconocimiento como figuras destacadas en campos nuevos de la Espectroscopía Molecular, como la Espectroscopía Láser.

#### Algunas direcciones útiles de Internet:

www.almaz.com/nobel/  
 www.corpserv.nrc.ca/corpsev/sphere/h\_7b\_e.html  
 www.hia.nrc.ca/moffatt/herzberg/interview/h\_7ba\_e.html  
 www.nrc.ca/herzberg/death.html  
 www.198.96.3.190/gherzberg/en/aboutgh\_an.html  
 www.starrymc.com/outreach/herzberg/herzberg.html  
 www.nobel.se/chemistry/laureates/1971/  
 www.science.ca/scientists/herzberg/herzberg.html



## REFERENCIAS

1. La denominación de "padre" utilizada en el título es frecuente en diversos campos de la ciencia, la técnica, las artes y especialmente en el mundo de la información y del espectáculo. P.e., al presidente de los Estados Unidos George Washington se le conoce informalmente como el "padre de la patria estadounidense".
2. *Spectrosc. Eur.* **11**(2), March/April, 6 (1999).
3. Herzberg, G., *Atomic Spectra and Atomic Structure*, Dover, New York (1944), 2nd ed.
4. Herzberg, G., *Molecular Spectra and Molecular Structure. I. Spectra of Diatomic Molecules*, D. Van Nostrand, Princeton, N.J. (1964).
5. Herzberg, G., *Molecular Spectra and Molecular Structure. II. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*, D. Van Nostrand, Princeton, N.J. (1949).
6. Herzberg, G., *Molecular Spectra and Molecular Structure. III. Electronic Spectra and Electronic Structure of Polyatomic Molecules*, D. Van Nostrand, Princeton, N.J. (1966).
7. Huber, K.P. and Herzberg, G., *Molecular Spectra and Molecular Structure. IV. Constants of Diatomic Molecules*, Van Nostrand Reinhold, New York (1979).
8. Herzberg, G., *The Spectra and Structures of Simple Free Radicals. An Introduction to Molecular Spectroscopy*, Dover, New York (1988).
9. "E.S.N. Interviews: Gerhard Herzberg", *Eur. Spectrosc. News* **39**, 15-23 (1981).
10. Herzberg, G., "Molecular Spectroscopy: A Personal History", *Ann. Rev. Phys. Chem.* **36**, 1-30 (1985).
11. Jungen, C., Dabrowski, I., Herzberg, G., and Vervloet, M., *J. Mol. Spectrosc.* **153**, 11-16 (1992); Dabrowski, I., DiLorenzo, G., Herzberg, G., Johns, J.W.C., Sadovskii, D.A., and Vervloet, M., *J. Chem. Phys.* **97**, 7093-7110 (1992). Últimos artículos encontrados.
12. Herzberg, G., *Ann. Rev. Phys. Chem.* **38**, 27-56 (1987). Revisión