

MECÁNICA CUÁNTICA

J. Sánchez Guillén*
Universidade de Santiago
de Compostela

1. NOVO SÉCULO, NOVA FÍSICA

A Física 'clásica', baseada nas leis de Newton da dinámica de partículas e as de Maxwell para o campo electromagnético, é o resultado de tratar de entende-la natureza á mesma escala en que se nos amosa, con obxectos de tamaño relativamente grande. A finais do século XIX parecía describir perfectamente tódolos feitos observados; incluso se deu un paso máis especulativo ó explicar Boltzmann a termodinámica aplicando estas leis ós aínda 'hipotéticos' átomos, que con tanto éxito viñan empregando os químicos durante todo o século. Incluíu para isto a teoría da probabilidade e información e, ademais, iniciábase así a Física teórica.

A medida que se foron desenvolvendo as técnicas experimentais e ía sendo posible observar 'realmente' os átomos e os seus contituíntes, viuse claro o comportamento da radiación e das partículas pequenas que se ían descubrindo, como o electrón, era ás veces

ben diferente do observado nas experiencias habituais con obxectos do tamaño do laboratorio. As leis da Física clásica non resultaban válidas no mundo atómico e subatómico.

En realidade non hai nada de asombroso en que as partículas pequenas non obedezan as leis da Física clásica, pois esta utiliza conceptos como os de posición, velocidade e traxectoria do movemento, baseados en experimentos realizados con obxectos grandes. É a nosa experiencia a que nos di, en particular, que ó medi-la posición x dunha partícula en varios intreos t_1, t_2, \dots , a diferenza entre dúas posicións Δx tende a cero cando o intervalo temporal entre as medicións correspondentes Δt tende tamén a cero. E á nosa escala de tamaños, parécenos obvio que podemos dividir tantas veces como queiramos estes intervalos sen que cambie nada relevante. Son estas observacións empíricas as que nos permiten defini-la velocidade como o límite $v = \lim (\Delta x / \Delta t)_{\Delta t \rightarrow 0}$. Con x e v determinados en todo momento podemos falar

* Catedrático de Física Teórica.

de traxectoria do movemento. Pero as extrapolacións son por veces enganosas, como sucedeu ó pensar que a Terra era chaira e, en efecto, ó pasar ó mundo atómico este esquema clásico resulta problemático. En primeiro lugar non está claro cómo podemos localizar partículas de tamaños tan pequenos e determina-las súas posicións x . Isto pódese resolver utilizando microscopios e feixes de luz láser, como instrumentos de medición. Pero resulta que se facemos outra medición, ó cabo dun tempo moi, moi curto Δt , atopámonos con que moitas veces a diferenca Δx coa posición anterior xa non tende a cero cando $\Delta t \rightarrow 0$. A medida que Δt diminúe, a diferenca Δx pode facerse cada vez máis errática. Ó repeti-lo experimento varias veces, obtemos valores tanto máis arbitrarios de Δx , canto menor é Δt . Está claro que ó baixar a escalas moi pequenas xa non se poden definir velocidades e traxectorias.

É evidente que a propia estrutura atómica pon límites ás divisións sucesivas indefinidas da materia. Iso xa non estaba claro para a enerxía e tardamos moito en decatarnos, aínda que, como se sabe pola relatividade, materia e enerxía son equivalentes. Existe unha escala dada pola constante de Planck

$$\hbar \sim 10^{-34} \text{ joules (J) segundos(s)} \quad (1)$$

que marca a fronteira para o dominio de aplicación ou validez da Física clásica. Como vemos, \hbar é [enerxía] \times [tempo] e representa a acción dun proceso, que é a enerxía cinética (subtraendo a poten-

cial cando a haxa) polo tempo que este dura, tendo en conta o seu comezo e fin e certos detalles do seu desenvolvemento. Cando as características dun sistema son tales que as súas accións correspondentes diminúen ata valores da orde de \hbar (o *cuanto* mínimo de acción), o que pasará ó considerar átomos e partículas *soltos*, o seu comportamento é ben distinto do previsto pola Mecánica clásica e debe describirse por outras leis: as da *Mecánica cuántica*.

A primeira vista pode semellar estraño e contra o sentido común: ¿como se pode predicir entón o comportamento das partículas co tempo?, ¿que sucederá ó ir considerando partículas máis grandes e pasar ó dominio das leis da Física clásica?... E ¿por qué todo isto?

O primeiro é lembrar que nos obxectos típicos da nosa escala de tamaños, hai polo menos 6×10^{23} átomos, que é o inverso da masa do protón ou neutrón medida en gramos, pois son estes os que lles proporcionan esencialmente a masa nos átomos. Polo tanto, as observacións clásicas son en certo modo o resultado de extrapolacións de millóns de millóns de millóns de millóns (24 ceros como mínimo) de partículas. Por iso os valores das enerxías, tempos e outras magnitudes das partículas atómicas e subatómicas resultan tan extremadamente pequenos se os medimos nas nosas unidades típicas da Física clásica (quilos, metros, etc.), como vimos arriba coa acción, que reflicte tódalas súas características.

Resulta que os experimentos efectuados directamente coas partículas mostran que, se ben as diversas fluctuacións das súas posicións, Δx , parecen arbitrarias como dixemos, a súa media si ten certa regularidade e iso é precisamente o que permite calcula-la Mecánica cuántica. Así, aínda que non poidamos defini-la velocidade instantánea no sentido clásico, si podemos facelo no sentido da media. Máis aínda, a Mecánica cuántica demostra cómo tenden a cero as Δx , ou sexa as *fluctuacións cuánticas*, ó iren aumentando os valores das magnitudes características dos obxectos. O mesmo ocorre con moitas outras magnitudes ademais das posicións ou coordenadas.

A idea de que as leis cuánticas se van achegando ás leis clásicas, ata coincidiren con elas nas condicións macroscópicas adecuadas, postulouse nos comezos da Mecánica cuántica (*principio de correspondencia* de Bohr) e foi unha axuda moi importante para a súa construción. En seguida se demostrou rigorosamente que as medias que calcula a Mecánica cuántica satisfán as leis clásicas. Quedaba por establecer cómo se realiza a dita transición cuántica-clásica e, sobre todo, comprobar se esta era de natureza cuántica, é dicir, se, en definitiva, as leis cuánticas eran universais e podían explicar tamén a propia Física clásica de Newton, Maxwell e Boltzmann. De feito, esta posibilidade, tan atractiva para a maioría, tivo detractores como o propio Einstein pois, como imos ver, encerra admiti-lo azar mesmo no comportamento indivi-

dual de cada partícula e, polo tanto, certo grao inevitable de indeterminación.

O paso á escala clásica, de tamaños grandes polo xeral, dáse de forma natural ó considerar moitas partículas (¡o difícil é illalas!). Esta transición denomínase tecnicamente *decoherencia* (por se chamar coherencia a propiedade detrás da indeterminación) e resulta, como xa apuntamos, da interacción das partículas estudadas coas outras moitas do *medio ambiente*. Como é lóxico, sempre se dá nas nosas medidas, pois os propios aparellos son xa un medio ambiente. O proceso de medida entraña evidentemente interaccións e é macroscópico.

Aínda que o problema é complexo e aínda quede algún aspecto menos claro, está ben entendido que ó pasar a obxectos máis grandes, o intervalo temporal mínimo para obter practicamente a media en cada medida se fai moi pequeno, de xeito que case sempre nos atopamos con este valor medio en cada proceso de medición, como sucede na Física clásica. ¡Para unha partícula de 1g e 1cm a temperatura ambiente, o tempo típico de desaparición das fluctuacións cuánticas é de 10^{-23} s! Dicimos 'case sempre' porque hai situacións excepcionais, nas que sistemas moi especiais como os superconductores, superfluídos, láseres ou estrelas de neutróns (*púlsares*), manteñen a tempos e distancias macroscópicas as propiedades cuánticas, coas súas fluctuacións características. Pero en xeral, para partículas macroscópicas esta Δt crítica

faise tan pequena que non ten ningunha importancia na práctica. Desde fai un par de anos hai experimentos que permiten estudar e comproba-los tempos de desaparición das fluctuacións cuánticas, demostrando de forma espectacular as predicións da Física cuántica, que aparece así como a teoría fundamental que o explica todo; agás a gravitación, que ten en construción a súa formulación cuántica, con resultados moi alentadores.

2. UN POUCO DE HISTORIA

O primeiro paso cara á Física cuántica deuno M. Planck no ano 1900. Aconteceu buscando unha fórmula que interpolase dous resultados teóricos que se obtiveran para a lei de distribución da radiación dun corpo negro coa frecuencia $I(\nu)$. Experimentalmente obsérvase unha curva cun máximo no centro, nas frecuencias medias. Utilizando diferentes suposicións, puidérase reproducir coa Física clásica a curva experimental só para as zonas inicial (baixas frecuencias) e final (altas frecuencias), ou sexa, as súas asíntotas para $\nu \rightarrow 0$ e $\nu \rightarrow \infty$. M. Planck conseguiu achar empiricamente unha fórmula moi sinxela para toda a curva, interpolando entre as dúas asíntotas. Presentouna nun primeiro artigo publicado en 1900 sen espertar un interese especial. Pero M. Planck observou que a súa fórmula coincidía perfectamente coa distribución experimental, demasiado perfectamente para ser unha casualidade. Tratou de comprender

cómo se podía chegar a esta fórmula teoricamente. Decatouse de que abondaba con facer unha soa suposición —¡pero ben estraña!—: que a enerxía do campo electromagnético só pode cambiar descontinuamente, por porcións ou cuantos de enerxía, e que cada un é proporcional á frecuencia ν

$$\epsilon_\nu = 2 \pi \hbar \nu \quad (2)$$

con \hbar a constante (ás veces utilízase $h = 2\pi\hbar$), da que se deu o valor determinado experimentalmente en (1).

Foi a primeira manifestación clara da nova Física, da fenomenoloxía cuántica. Sen embargo necesitáronse case outros trinta anos para chegar á formulación teórica actual da Física cuántica. Foron moitos os físicos que fixeron grandes achegas ó seu desenvolvemento ademais de M. Planck. A. Einstein creou en seguida a teoría do efecto fotoeléctrico utilizando a hipótese de cuantización de M. Planck. Púidose verificar así directamente que a enerxía do campo electromagnético se transmite sempre polos cuantos de Planck, non só na emisión. Máis tarde, N. Bohr enunciou os seus postulados de cuantización para explica-los espectros de radiación atómica. Aínda que era un modelo e moi sinxelo, foi unha síntese xenial dos elementos básicos da Física cuántica, como imos ver no seguinte apartado. Ademais, acadou grandes éxitos experimentais, como a resolución do problema dos distintos elementos (helio especialmente) nos espectros de estrelas, que deu convencido a Einstein da súa validez. Precisamente



Max Planck e Albert Einstein, primeiro e terceiro pola esquerda, nunha recepción en Berlín no ano 1931.

foi este quen demostrou por fin rigorosamente a propia fórmula da radiación de Planck utilizando os principios cuánticos coa idea de probabilidade de Boltzmann, dando orixe á formulación moderna cuántica de campos.

Pero a Física cuántica como teoría (e non como receitas para calcular algúns casos particulares) empezou coa idea de L. de Broglie de que a materia (partículas) tamén posúe propiedades ondulatorias en analoxía co campo electromagnético, do que se acababa de establecer o aspecto dual corpuscular. O seu razoamento foi moi lóxico e xa o usamos arriba: se na relatividade son simétricas (intercambiables) materia e

enerxía, e a radiación (enerxía ondulatoria) compórtase tamén como partícula, as partículas (materia) deben comportarse pola súa vez como ondas para manter a simetría. Baseándose nesta idea, W. Heisenberg e E. Schrödinger puideron formular as bases da Mecánica cuántica en 1925-1926.

Por se-la nova ciencia tan diferente da Física clásica, requiriuse moito esforzo para a súa comprensión e para o desenvolvemento do formalismo matemático adecuado. M. Born, N. Bohr, P. Dirac e W. Pauli contribuíron notablemente. O problema maior de Schrödinger foi que empezou co caso relativista, que era, como vimos, o que

se podía formular mellor seguindo principios xerais. Pero a interpretación das solucións que se obtiñan parecía imposible. Ademais, o problema que quería resolver como demostración da nova teoría, os átomos lixeiros, é moi pouco relativista, pois as velocidades dos electróns son centos de veces menores cá da luz. Por iso, a súa ecuación e a ideoloxía básica cuántica son un dos saltos creativos máis sorprendentes da Física.

Foron Dirac e Pauli, seguindo os pasos de Einstein, os que conseguiron interpreta-la teoría relativista coa novidade de que describe, canda a materia, as antipartículas, a predicción máis espectacular da Mecánica cuántica relativista. Esta teoría, chamada tamén cuántica de campos, resultou de tal complexidade que non foi resolvida ata hoxe. Os principios e interpretación son comúns á Mecánica cuántica non relativista de Schrödinger.

A Física cuántica describe o comportamento de obxectos pequenos con accións da orde da constante de Planck. É difícil imaxinalo que iso significa, entre outras razóns porque, como dixemos, a acción non é un concepto intuitivo. Vén a corresponder a unha suma acumulativa do tempo pola enerxía cinética dunha partícula (se é libre) do intre inicial ó final do seu percorrido. Na Física clásica séguese unha traxectoria que a fai mínima. En xeral, unha acción pequena corresponde a moi pouca enerxía ou a moi pouco tempo, como é o caso típico dos constituíntes últimos da materia. Recordemos que

nun gramo hai da orde de 6×10^{23} átomos. Así, para mover un gramo un centímetro coas achegas enerxéticas dun átomo, necesitaríamos esperar 10^{27} segundos (un ano ten só 10^7). Son, polo tanto, as leis da Física cuántica as que describen o comportamento das partículas elementais como o electrón, o protón, o neutrón, o neutrino e moitas máis. Tamén a Física atómica, nuclear e en parte molecular pertencen ó dominio da Física cuántica. A Física cuántica, desde logo, non invalida a Física clásica: os obxectos macroscópicos con accións moito maiores ca \hbar obedecen as leis clásicas cunha gran precisión. De feito, como vimos, a Física cuántica explica precisamente, a través da decoherencia, o comportamento clásico. En moitos casos, con todo, os efectos cuánticos séntense ata a escala macroscópica. Así sucede cando se consideran fenómenos a moi baixas temperaturas e, por conseguinte, con movemento moi lento das partículas, e se consegue unha acción coordinada (*coherente*) dun gran número deles, no estado sólido ou na radiación electromagnética. Só a Física cuántica puido explicalo comportamento dos electróns nos corpos sólidos, ou fenómenos como a superconductividade e a superfluidez, e conducir a inventos como o láser. Polo outro extremo, hai partículas cósmicas de tal enerxía (10^{20} e V) que individualmente teñen un comportamento practicamente clásico na súa interacción ó chegar á Terra.

Subliñemos finalmente que a influencia da Física cuántica non se

esgota coas posibilidades extensas das súas aplicacións, que claramente están a marca-lo noso futuro. A Física cuántica constitúe un paso revolucionario no desenvolvemento da Física enteira como ciencia e posiblemente ata no desenvolvemento da mente humana e a súa comprensión do mundo. Demostra moi claramente que o noso coñecemento non debe pretender explicar sempre as novas rexións de fenómenos da natureza polos métodos antigos, empregados anteriormente. Tampouco a ciencia debe abstraerse da observación, porque é unha parte da ciencia mesma e inflúe de xeito decisivo nas cuestións que poden suscitarse. Ademais ensínanos que os métodos de descrición dos fenómenos observados poden ser moi distintos do que sabemos desde hai séculos, facéndose menos indirectos e necesitando un formalismo matemático pouco común.

Os éxitos da Mecánica cuántica fixéronnos ós físicos do cambio de milenio moito máis audaces e emprendedores en comparación cos anteriores. Nos anos seguintes á demostración da teoría cuántica de campos ou relativista a mediados dos oitenta, propuxéronse varios esquemas do universo bastante revolucionarios, que inclúen a súa propia orixe. Abranguen dimensións adicionais ás tres ordinarias e as partículas *elementais* como vibracións de cordas, en vez de puntos sen dimensión, e as súas xeneralizacións a *membranas*. Ideas da Mecánica cuántica tales como as de indeterminación (impensables antes), déixanse sentir nou-

tras ramas do coñecemento, mesmo alén das ciencias.

3. PROPIEDADES ONDULATORIAS DAS PARTÍCULAS

A idea de que toda partícula posúe propiedades ondulatorias foi publicada por L. de Broglie no ano 1923. Postulou que co movemento dunha partícula de *momento* $p = mv$ (ou sexa, *masa x velocidade*), está asociada unha onda de lonxitude

$$\lambda = h/p \quad (3)$$

Hai varias observacións que conducen a esta idea. Non imos segui-lo camiño histórico, senón que discutíremolos dous fenómenos máis demostrativos.

Un dos feitos físicos que non se pode explicar de ningunha maneira polas leis da Física clásica é a estrutura do átomo. Segundo os experimentos de Rutherford, os átomos son como sistemas solares en miniatura: cunha partícula pesada no centro, o núcleo, de tamaño cen mil veces menor có do átomo, cargado positivamente, arredor do cal xiran un ou varios electróns cargados negativamente. Considerarémolo caso máis sinxelo do átomo de hidróxeno, cun só electrón xirando arredor dun protón. A lei de Newton para a forza $F = ma$, onde a é a aceleración centrífuga, e a de Coulomb para a enerxía potencial $V = -e^2/r$, onde e é a carga do protón, dannos en seguida o valor da enerxía total das órbitas, $E_t = -e^2/2r$,

que poden considerarse aproximadamente circulares, sendo r os seus radios. Como vemos, pode tomar calquera valor, iso si, negativo pois o electrón está ligado ó protón e, polo tanto, E_i diminúe canto maior sexa o seu valor numérico (ou *absoluto*), é dicir, canto *menor* sexa o radio r . Segundo as leis de Maxwell ou electrodinámica clásica, toda partícula cargada con aceleración emite ondas electromagnéticas e perde enerxía. Polo tanto, como vimos, o radio do electrón iría diminuindo de continuo, é dicir, iría caendo cara ó protón no centro. No seu camiño o electrón emitiría radiación, cunha frecuencia dada pola de rotación, que evidentemente aumenta ó se facer menor o radio, pois é o número de *voltas* por segundo. O espectro de radiación sería un continuo con tódalas frecuencias maiores cá correspondente ó radio inicial e o átomo deixaría sempre de existir ó acabar o electrón no protón.

Así sería a imaxe do átomo segundo a Física clásica. Ten pouco que ver co que se observa experimentalmente. Que a súa vida deba rematar necesariamente contradí rotundamente o feito de que o átomo de hidróxeno pode existir un tempo indefinido. O espectro do átomo de hidróxeno tampouco é nada continuo na realidade. Experimentalmente obsérvase un conxunto de liñas con frecuencias discretas, que se describen pola relación empírica de Balmer

$$\nu = R (1/n^2 - 1/m^2) \quad (4)$$

con m e n enteiros ($m > n$) e R a constante de Rydberg de frecuencia.

¿Como se podería tratar de dar unha explicación a estes feitos experimentais? É ben sabido que, para explicar (4), N. Bohr supuxo que a enerxía do electrón no átomo pode tomar só algúns valores discretos E_n , como xa mostrou o efecto fotoeléctrico. Como a frecuencia da onda emitida ó pasar o electrón do nivel E_m ó E_n virá dada segundo a relación de Planck (2), teremos

$$\nu = (E_m - E_n) / 2\pi\hbar \quad (5)$$

polo que evidentemente ha verificarse que

$$E_n = -2\pi\hbar R / n^2 \quad (6)$$

para obte-lo resultado experimental (4). Este valor deduciuno Bohr aplicando as leis de Newton e Coulomb, como queda descrito, pero para cada órbita circular discretizada e, sobre todo, co seu principio de correspondencia. Con este xustificou a parte máis difícil, que foi a relación da frecuencia de radiación ν coa do movemento circular e que obtivo de trata-los electróns como un dipolo clásico entre dúas órbitas extremas.

A demostración da hipótese de discretización dos niveis enerxéticos do electrón nun átomo proporcionouna a Mecánica cuántica. En realidade pódense entender xa os valores tan particulares (6) das propiedades ondulatorias do movemento dos electróns, que foi precisamente o punto de partida de Schrödinger para a súa formulación

xeral e matematicamente rigorosa. Resumímo-lo argumento, pero podemos crelo e saltar ó parágrafo seguinte.

En efecto, supoñamos que co electrón estea asociada dalgún xeito unha onda que se propaga ó longo da súa órbita do mesmo modo que o fai a onda nunha corda pechada nunha circunferencia. Sabemos que unha onda así non pode ter unha lonxitude de onda calquera, senón que ha de ser discreta: a súa lonxitude ha de ser un divisor da lonxitude da órbita e vén dada por $\lambda_n = l/n = 2\pi r_n/n$ con n un número enteiro. Utilizando a condición de Broglie (3) pola que $\lambda_n \times p_n = 2\pi\hbar$, obtémola ecuación (6) facilmente e co propio valor da constante ($R = me^4/4\hbar^3$); basta ter en conta que a enerxía cinética $p_n^2/2m$ coincide en valor absoluto coa enerxía total $-e^2/2r_n$ e substituír p_n . Tamén se deduce axiña que $r_n \times p_n = 2\pi n\hbar$, é dicir, que o momento angular das partículas está así mesmo cuantizado. Este resultado, de capital importancia para a estrutura da materia, tamén o descubriu Bohr como unha consecuencia das súas hipóteses.

Aínda que o estudio dos átomos foi moi significativo, existen probas máis directas do comportamento ondulatorio das partículas pequenas como o electrón. Baséanse no fenómeno de interferencia característico das ondas (¡tan coñecido nas de radio!) e ausente nas partículas clásicas. Un dos experimentos máis conclusivos foi o de Davisson e Germer no ano 1927. Aínda que realizado despois da creación da Mecánica cuántica, permanece ata hoxe

un dos indicadores máis claros das manifestacións cuánticas no movemento das partículas, polo que merece unha discusión máis detallada.

Estudiaron a reflexión dun feixe de electróns incidente sobre un cristal baixo certo ángulo, seguindo o esquema usado anteriormente para a investigación da natureza dos raios X. Obsérvanse así os electróns reflectidos nos diversos planos paralelos da rede cristalina mediante un detector ó que se lle pode variar a posición. Os electróns percorren camiños distintos e, se tivesen un comportamento ondulatorio, haberá interferencia entre eles. Esta



Louis de Broglie chegou á conclusión de que electróns e protóns podían ter, coma a luz, propiedades ondulatorias.

maniféstase con máximos de intensidade, para certos valores do ángulo, a distancia entre os planos e a lonxitude de onda λ . É o mesmo que sucede cos raios X e moi análogo ó arco da vella, onde os planos son a capa de auga que atravesa a luz solar.

Para partículas clásicas non se esperaba ver interferencia ningunha nin, polo tanto, máximos nin mínimos. Pero o experimento realizado por Davisson e Germer deu resultados inequívocos: os electróns produciron unha interferencia clara cos máximos característicos. A lonxitude de onda de electróns con velocidades diferentes mostrou tamén de acordo co postulado de De Broglie (3).

Cabe subliñar que este tipo de experimento pode demostrar aspectos aínda máis profundos e significativos descubríndonos en boa medida o que significa a natureza ondulatoria das partículas. O patrón de interferencia dos electróns non depende da intensidade do feixe incidente, e así ata que se chega a intensidades tan baixas como para pensar que só uns poucos electróns (ou ata un único electrón) caían sobre o cristal. ¿Que debe suceder neste caso? De Broglie pensaba que o electrón mesmo é como un paquete de ondas. Entón un só electrón debería dalo mesmo patrón de interferencia ca moitos deles, aínda que cunha intensidade moi baixa, é dicir, a mesma imaxe de interferencia. Pero en realidade sucede algo ben diferente. Cada electrón dá un só punto na pantalla do detector, isto é, reflíctese cun ángulo

fixo e compórtase, polo tanto, como unha verdadeira partícula, enteira e puntual, sen se desdobrar en partes. Aparentemente os ángulos ou posicións dos puntos onde aparecen na placa resultan arbitrarios. Sen embargo, ó repeti-lo experimento moitas veces os puntos vanse ordenando nun histograma regular que tende a coincidir coa curva do patrón de interferencia. Podemos concluír de aí que o electrón non é un paquete de ondas no sentido clásico, senón que o que proporciona a súa onda asociada é máis ben a probabilidade de aparecer nun determinado lugar.

É instructivo tamén ve-lo que ocorre cando o experimento do tipo Davisson e Germer se realiza con partículas meirandes. Para p crecente a lonxitude de onda λ faise moi pequena. A imaxe de interferencia amosa moitas oscilacións. Os detectores teñen a súa resolución propia e chega un momento no que non poden distinguir entre máximos veciños, indicando entón unha distribución homoxénea efectiva que resulta ó face-la media sobre as oscilacións de interferencia. A imaxe é logo a que corresponde ás partículas na Física clásica. Como vemos, a transición da rexión cuántica á clásica procede dunha maneira bastante peculiar. Non se pode dicir que para partículas grandes non haxa interferencia; máis ben a interferencia resulta inobservable, de modo que as partículas grandes poden ser descritas nos termos da Física clásica.

4. MECÁNICA CUÁNTICA: FUNCIÓN DE ONDA E OBSERVABLES

A conclusión que se segue dos feitos experimentais e mellor os explica é que o estado dunha partícula cuántica non vén caracterizado por certos números (os valores das coordenadas e momentos) como na clásica, senón por unha *función*, chamada *de onda* e que adoita designarse coa letra grega $\psi(t, \mathbf{r})$. Representa tódalas posibles propiedades (*ψ qué*), en todo instante (*t, cánd*) e lugar (*\mathbf{r} , ónde*). É o primeiro principio da Mecánica cuántica. Resulta así que especificar un estado nesta require moita máis información que na mecánica clásica. Os estados caracterízanse agora por funcións. A mecánica cuántica baséase en que *a función de onda determina por completo o estado dunha partícula*, o que significa estrictamente que non fai falla engadir ningunha outra información para saber todo o posible da partícula en consideración.

É lóxico que unha información tan absoluta teña un contido restrinxido. Como vimos, a función de onda non implica que a propia partícula sexa exactamente un paquete de ondas, unha perturbación localizada, senón que a dita función se refire só á probabilidade de presenza da partícula en calquera punto do espacio. A interpretación probabilista da función de onda, que foi proposta e elaborada por M. Born, N. Bohr e W. Heisenberg nos anos 1926 a 1930, está nos fundamentos da Mecánica cuántica. O seu enunciado

preciso di que *a función de onda dunha partícula $\psi(t, \mathbf{r})$ representa a probabilidade, mediante o seu módulo ó cadrado $|\psi(t, \mathbf{r})|^2$ de encontra-la partícula en torno a \mathbf{r} do espacio no instante t .*

Esta é a versión máis simple. A estrutura matemática permite —e a natureza utilízao en efecto— atributos moito máis sutís cá posición, como novos tipos de cargas ou momentos angulares intrínsecos (*spins*).

É unha peculiaridade moi importante da Física cuántica que unha partícula que se encontra nun estado (con función de onda ψ_1) poida estar á vez con certa probabilidade noutro estado (función de onda ψ_2). Isto débese a que, dito sinxelamente, hai máis funcións de onda diferentes ca estados independentes. Nesta situación, a función de onda que ha conter tódalas posibilidades do sistema será unha combinación de ψ_1 e ψ_2 , o que implica interferencia entre ambas. A probabilidade de presenza da partícula nun punto calquera virá dada entón, non só pola suma dos seus módulos ó cadrado, senón tamén polo produto ou *solapamento* de ambas. Esta contribución adicional á probabilidade, análoga a un termo de interferencia, amosa que a información probabilística contida nas funcións de onda se diferencia das leis estatísticas clásicas nas que a probabilidade se refire ó comportamento do colectivo. Pero na Mecánica cuántica a probabilidade é un atributo de cada partícula: *o azar chega ata o individual*.

Un exemplo para visualizar claramente isto proporcióno o experimento *Gedanken* da dobre físgoa, que asigna as funcións de onda ψ_1 e ψ_2 ás dúas posibilidades independentes que ten cada electrón de chegar ós detectores dunha pantalla de observación pasando por unha das dúas físgoas. Logo de repetir este experimento imaxinario moitas veces, o histograma de rexistros correspondente ó módulo ó cadrado da función de onda total tendería a unha figura típica da difracción, co seu máximo principal e os secundarios.

Vexamos agora o que ocorre cando se intentan medir valores das coordenadas de posición ou momentos dunha partícula na mecánica cuántica. Como mostra o experimento, cada medición proporciona por si mesma un valor aleatorio de tódolos posibles, con probabilidade dada *a priori* polos módulos ó cadrado das funcións de onda correspondentes. Ó repeti-las medicións podemos calcula-los *valores medios* da coordenada ou do momento cos valores resultantes de tódalas medidas.

Son estes valores medios os que presentan certa regularidade, como dixemos, e polo tanto son os que constitúen o obxecto do estudio e descrición da Mecánica cuántica; ó entrar no dominio da Física clásica, pasan a se-las magnitudes ordinarias desta. Coñecendo as probabilidades de encontrar unha partícula en calquera punto do espacio ou cunha certa velocidade a través das funcións de onda respectivas, pódense predicir estas medias (ou valores esperados). Para o

seu cálculo, tratándose de funcións, non é estraño que as coordenadas de posición ou as velocidades veñan dadas polas *operacións* sobre estas funcións que as ditas magnitudes representan na súa caracterización matemática. Estas operacións son a multiplicación e derivación respectivamente.

As magnitudes observables en Mecánica cuántica correspóndense, en efecto, a *operadores* en linguaxe matemática, e indícanse adoito con letras maiúsculas $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. O máis importante de todos é sen dúbida o que representa a enerxía, que se chama *hamiltoniano* e se indica por $H(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Acostuma te-la mesma estrutura que na Física clásica, suma do termo cinético $p^2/2m$ e potencial $V(\mathbf{r})$ (como o de Coulomb $-e^2/r$ por exemplo) só que agora \mathbf{r} e \mathbf{p} son operadores, que gañan a vida derivando e multiplicando as funcións de onda.

5. A ECUCACIÓN DE SCHRÖDINGER

Ata agora discutimos cómo se describe unha partícula en Mecánica cuántica nun instante dado t : toda a información acerca dela está incluída na súa función de onda $\psi(t, \mathbf{r})$. Agora imos discuti-la súa evolución no tempo. Como na Física clásica, suponse que se se coñece toda a información necesaria sobre a partícula nun instante inicial, o seu comportamento futuro está determinado.

Isto significa en Mecánica cuántica que, ó da-la función de onda no ins-

tante inicial, podemos calculala en calquera outro intre. Este principio realízase aquí por medio dunha ecuación para $\psi(t)$, análoga ás ecuacións de onda clásicas pero cunha soa derivada respecto ó tempo, indicada por d/dt . Descubriuna Schrödinger no ano 1926 ó tratar de reproducir-lo comportamento ondulatorio das partículas e xeneralizalo para potenciais de calquera tipo,

$$i\hbar \frac{d\psi(t, \mathbf{r})}{dt} = H(\mathbf{r}, \mathbf{p})\psi(t, \mathbf{r}) \quad (7)$$

Esta ecuación substitúe a Lei de Newton para as partículas cuánticas. Na forma seméllase á de difusión da calor, inventada por Fourier, pero é complexa ($i = \sqrt{-1}$), involucra operadores e o importante, como levamos visto, é a propia función, cun módulo que é unha probabilidade.

A forma de proceder é expresa-lo hamiltoniano (ou sexa, a enerxía cinética e potencial) mediante os operadores correspondentes e resolve-la ecuación coas condicións especiais que caracterizan o sistema ou proceso (ás veces a condición é simplemente que as propiedades relevantes son estacionarias e non mudan no tempo). Así, obtemos $\psi(t, \mathbf{r})$ e con ela en principio sabemos todo o que se pode saber. Como analizamos a continuación, as medicións en cuántica supoñen un certo cambio brusco a unha das posibilidades que $\psi(t, \mathbf{r})$ representa con probabilidade $|\psi(t, \mathbf{r})|^2$. Pero a evolución da función de onda entre medidas, que é o que representa a ecuación de Schrödinger, é

continua e determinista e por iso pode resolverse sen ambigüidade.

A ecuación de Schrödinger non se deduce na mecánica cuántica senón que é un postulado derivado de observacións empíricas. Sen embargo, pódese xustificar *a posteriori* considerando as súas consecuencias e comparándoas co que en realidade ocorre na natureza. Como dixemos en 1, é moi doado demostrar que da ecuación de Schrödinger se segue que os valores medios de observables satisfán as leis da Mecánica clásica (o principio de correspondencia). Isto significa que as partículas de tamaño grande (ordinarias), con fluctuacións moi pequenas nas súas variables, descríbense pola Mecánica clásica cunha gran precisión, de acordo coa nosa experiencia práctica. A Mecánica cuántica é realmente completa e explica incluso cándoo é máis práctica a descrición clásica.

6. INCERTEZA CUÁNTICA

Pasemos a discuti-lo que ocorre ó tratar de medir unha magnitude física calquera, como as coordenadas \mathbf{r} , momentos \mathbf{p} ou combinacións de ambas que en xeral representamos por $A(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Interésanos especialmente a precisión coa que se poden determinar. Ó efectuar medicións repetidas veces, obtense un conxunto de valores experimentais que fluctúan arredor do valor medio e a magnitude destas fluctuacións determina a precisión do noso coñecemento de A . Canto menores

sexan estas, tanto maior será a precisión do observable A . Como medida das fluctuacións adóitase introducir na teoría de probabilidade a *dispersión* ΔA , que non é máis que a media do cadrado das desviacións das medidas individuais respecto ó valor medio. ΔA vén dada directamente pola función de onda e está claro que é tanto maior canto máis ancha sexa a expresión do seu módulo $|\psi(t, \mathbf{r})|^2$.

Preséntase un problema de gran importancia: ¿existen casos nos que a dispersión ΔA é igual a cero? É moi fácil convencerse de que si, e que para isto a función de onda non pode ser calquera senón que ha satisfacer unha relación moi especial co que tratamos de medir. A idea é simple: unha vez medido, sabemos exactamente en qué estado se atopa. A formulación matemática é tamén moi sinxela e as funcións que a satisfán chámanse autofuncións ou funcións *propias* do operador A . Para as funcións propias dos operadores correspondentes ás magnitudes físicas, as súas medidas non fluctúan: os seus valores coinciden sempre co medio e chámanse autovalores ou valores propios. Chegamos así a unha caracterización matemática do proceso de medida:

Cando nun experimento se mide unha magnitude característica dunha partícula, como resultado deste, a partícula queda coa función propia correspondente ó autovalor medido.

Significa que do catálogo completo de posibilidades que representa *a priori*

a función de onda, ó medir selecciónase unha: o resultado. Antes de medir só sabíamo-la probabilidade de obter un certo valor; despois de medir, a función de onda queda *reducida* á correspondente a ese valor medio exclusivamente. Sucesivas medidas desa *mesma* magnitude sempre darán o mesmo resultado, *con certeza absoluta*.

Se efectuamos en cambio a medida *doutra* magnitude *distinta*, teremos en xeral só certa probabilidade de achar un valor dado. O máis sorprendente acontece se facemos unha terceira medición consecutiva, volvendo medi-la primeira das magnitudes, a que era *certa* antes da segunda medida. Como agora a certeza xa pasou á segunda magnitude, para a primeira volvemos ter só certa probabilidade.

Aparece así outra complicación moi característica da Mecánica cuántica: ¿cales son as condicións para que poidamos medir varias magnitudes físicas á vez? Na Física clásica sempre é posible. Pola contra, na Mecánica cuántica só é posible cando esas magnitudes poidan comparti-las mesmas funcións propias e que estas o sexan á vez de tódolos operadores que as representan. Iso só ocorre en casos excepcionais, cando as magnitudes A, B, C, \dots polas que nos preguntamos teñen unha propiedade especial: que non importe a orde na que facémo-las preguntas (as medidas). ¡A vida cotiá está chea de exemplos nos que a orde das preguntas inflúe nas respostas! Na linguaxe matemática, *as cantidades físicas poden ser medidas simultaneamente sempre que os*

seus operadores correspondentes polos que se representan sexan **conmutables**.

Volvendo ás características dunha partícula, resulta que as representacións matemáticas de \mathbf{r} e \mathbf{p} (producto e derivada) non son conmutables. Por iso na *Mecánica cuántica non se pode medir á vez unha coordenada e a compoñente do momento (ou velocidade) na mesma dirección*.

A restricción sobre as medicións de \mathbf{r} e \mathbf{p} pódese formular de forma precisa como unha cota infranqueable, dada pola constante de Planck e chámase *principio de incerteza* de W. Heisenberg.

$$\Delta r \Delta p \geq \hbar / 2 \quad (8)$$

Significa que canto maior sexa a precisión da coordenada, tanto menor será a do momento e viceversa, de forma que o seu produto sexa sempre



De esquerda a dereita: Jan Aler, Max Steenbeck e Warner Heisenberg. O último é o pai do *principio de incerteza*.

polo menos $\hbar / 2$. Obsérvase que nas condicións da Física clásica, \hbar pode tomarse como nula e por iso non hai incerteza na práctica.

Cabe subliñar que a relación (8) non é de seu algo completamente novo na Física. Na teoría clásica do movemento ondulatorio aparece unha certa restricción sobre a localización dun paquete de ondas. Pensemos, por exemplo, que habemos de recibir polo menos un período completo para detectar un ton musical correspondente a unha vibración.

O que trae de novo a Física cuántica, á parte da interpretación, é que a indeterminación se aplica a toda partícula e é polo tanto unha relación universal. Suscitou moitas discusións no momento da creación da Física cuántica, porque parecía non estar de acordo coa nosa experiencia, que, a primeira vista, permitiría realizar unha medición de \mathbf{r} e \mathbf{p} con maior precisión cá limitada por (8). Propuxéronse varios experimentos que puideran contradicilas relacións de incerteza (8). Todos eles, así como calquera dos múltiples experimentos reais ou mentais (*Gedanken*) para falsificala, teñen explicación clara dentro da Física cuántica.

7. SIMETRÍAS E LEIS DE CONSERVACIÓN

A idea de simetría non é nada novo da Física cuántica. Tamén no mundo clásico, como é ben sabido, hai moitos casos nos que se manifesta

algunha simetría, que sempre conduce a unha simplificación importante do seu tratamento. Así sucede, por exemplo, cando o potencial no que se move a partícula non depende dos ángulos, senón só da distancia á orixe: as forzas centrais. Entón o problema simplifícase moitísimo de xeito que fai posible a súa resolución xeral. Na Física cuántica o fenómeno de simetría ten un papel aínda máis importante. Esencialmente débese a dúas razóns:

- A propia formulación do problema na Mecánica cuántica é moito máis conveniente para a manifestación dunha simetría que na Mecánica clásica; nesta, os valores iniciais de \mathbf{r} e \mathbf{p} dunha partícula destrúen a simetría, escollendo unha traxectoria de entre tódalas posibles, a cal en por si pode non posuír simetría ningunha. Na Mecánica cuántica, en cambio, a función de onda non involucra nada que poida contradicila simetría. A mesma formulación do problema aquí é simétrica e así as consecuencias dunha simetría na Mecánica cuántica adoitan ser moito máis claras.

- A Física cuántica pretende se-la ciencia que explica a estrutura do micro e do macrocosmos e, polo tanto, dar unha explicación á existencia das propias forzas. O feito de que, por exemplo, un campo sexa central, para a Física cuántica non é un fenómeno puramente empírico. Trata de comprender por qué é central. Como unha posible liña de explicación (e case a única) úsase precisamente a idea de simetría; é dicir, pártese da idea de que

o potencial debe ser central por esixencia da simetría. Con esixencias de simetría aínda máis fortes soubo chegar a poder determinar case univocamente as propiedades das forzas fundamentais, que actúan entre as partículas na natureza, como ocorre coa invariancia de fase local chamada *gauge*.

Esta simetría reflicte a posibilidade de cambia-las funcións de onda das partículas en todo o que non afecta á probabilidade, dada polo seu módulo ó cadrado, como o signo ou, máis en xeral, a *fase*. Se esta elección se fai dunha vez e igual en tódalas partes, ou sexa, *globalmente*, só se consegue unha simplificación para os cálculos; pero se, como é máis natural, se reivindicada a liberdade de elección en calquera instante e en calquera lugar, ou sexa, para cada \mathbf{r} e t , sucede algo de gran transcendencia: aparecen os axentes mediadores das forzas fundamentais e con tódalas súas propiedades completamente determinadas. É a única forma de asegura-la dita liberdade de elección.

8. INTERPRETACIÓN DA MECÁNICA CUÁNTICA

Nos apartados precedentes describimos cualitativamente a ideoloxía básica da Mecánica cuántica, utilizando unhas poucas fórmulas para dar unha impresión o menos vaga posible. Esta xurdiu da experiencia e pasou innumerables comprobacións experimentais, algunhas deseñadas especialmente para buscar calquera contra-

dicción. Chámaselle ás veces a *interpretación de Copenhaguen* ou *ortodoxa* por razóns históricas e tamén porque existen algunhas interpretacións alternativas para tratar de evitar ou facer máis comprensibles algúns dos seus aspectos menos alcanzables para a intuición clásica. Entre as cuestións que presentaron dificultades destacámo-las seguintes.

A) FORMALISMO MATEMÁTICO

Como levamos visto, a Mecánica cuántica utiliza matemática moito máis abstracta cá clásica, o que non satisfizo a algúns nos seus comezos, pois parecíalles que a concepción da realidade se evaporaba nun formalismo.

Efectivamente, a Mecánica cuántica require unha matemática máis complexa, pero hai que lembrar que estaba xa construída e ben entendida. Ademais, é natural que problemas máis complicados precisen ferramentas máis avanzadas. De feito, hoxe utilízanse habitualmente as técnicas típicas da Mecánica cuántica para os problemas clásicos complexos, como os de moitos corpos ou non lineais. Onde este primeiro inconveniente si se manifesta claramente é na gravidade cuántica, en plena eclosión actualmente. Aquí os físicos temos de construí-la ferramenta matemática, o que está resolvendo algúns problemas pendentes desta. Ás veces as teorías físicas nacen co cordón umbilical do formalismo do que logo se desprenden ó entenderse mellor,

pero outras veces, como ocorreu co cálculo diferencial de Newton e Leibniz no nacemento da Mecánica, o formalismo é realmente importante e unha contribución adicional da Física.

B) COÑECEMENTO LIMITADO

A restricción esencial sobre o coñecemento dun sistema ás probabilidades que encerra a súa función de onda foi, como dixemos, difícil de aceptar ó principio, mesmo por grandes físicos, como nos recorda a famosa frase de Einstein de que o creador non pode xogar ós dados. Curiosa frase se se pensa que todo o que acontece na natureza, desde a grande explosión, pode considerarse como un gran xogo, ou sexa, o resultado do azar suxeito unicamente ás leis da física e poucas máis. A cuestión desde a Física é se a Mecánica cuántica é completa ou non. É dicir, se existen outras variables que non coñecemos, ocultas, que polo tanto só se manifesten nunha media.

Bell elaborou sistematicamente as consecuencias desta proposta, partindo do feito simple de que se o número de variables aumenta, é lóxico que a media das mesmas magnitudes non sexa igual á predicada pola cuántica. Téñense realizado moitos experimentos para dilucidar esta cuestión, que tamén comprobaban o propio proceso da media discutido a continuación, coa resposta sempre favorable á Mecánica cuántica.

C) O PROCESO DA MEDIDA

Pode parecer coma se o propio proceso de medición, esencial na Mecánica cuántica, producise o resultado. Tamén orixinou reservas a redución brusca da función de onda á correspondente ó valor medio. Utilizando leis de conservación absolutas, como a carga eléctrica ou similares, e experimentos con varias medicións separadas, pódese formular como unha aparente transmisión instantánea de información, contra o principio de causalidade e a relatividade.

Como ilustración, supoñamos unha función de onda moi estendida no espacio dun sistema con só dúas posibilidades. Se se mide nun dos extremos, a función de onda queda colapsada á opción obtida e xa sabemos o que non obterá a media no outro extremo (que pode traducirse ó que se obterá con certeza se se trataba dunha dicotomía). Esta información é virtual: non se pode facer efectiva ata que non se comuniquen os medidores e comparen, polo que non viola a causalidade. En calquera caso, esta realidade virtual é un feito comprobado e que ten incluso moitas aplicacións prácticas, sempre limitadas pola velocidade finita da comunicación da información. Ás veces chámanlle realismo local ós intentos de evitar estas conclusións, sobre todo coas variables ocultas, que como dixemos nunca se manifestaron.

De tódolos xeitos, hai que admitir que o *colapso* da función de onda

aparece como algo brusco e descontrolado. O proceso de medida é esencial, pero en certo modo pode considerarse externo á Mecánica cuántica e, en definitiva, clásico. Por iso algúns físicos pensaron respostas a este posible problema conceptual, que pertencen máis ben ó terreo da epistemoloxía. Móvense entre dúas opcións extremas; unha é recorrer á consciencia dicindo que se produce na mente. Un dos problemas sería a Cosmoloxía, que está tratando o universo completo. O outro extremo é dicir que en realidade non hai tal colapso. Non sería máis que un atallo para calcular certas propiedades, que representa unha complicada superposición obxecto-equipe de medida. Nesta liña, a análise detallada da Física, tanto formal como experimental, da transición cuántica-clásica (a *decoherencia*), como interacción co medio, está progresando moito na actualidade. Isto permite explicar, como dixemos, coa mesma Mecánica cuántica a transición á clásica e o propio proceso de medida.

No ámbito máis filosófico da interpretación, as propostas foron desde as máis conservadoras que avogan por unha distinción entre os terreos cuántico e clásico co resultado dunha especie de media co mesmo resultado. Ou de forma máis radical, recorrer á existencia de camiños ou 'mundos' paralelos de forma que, en cada medida, o que se percibe como colapso non é outra cousa que a evolución cara a un deles. Esta opción foi quizais a máis elaborada.

9. EPÍLOGO

A Mecánica cuántica naceu co século XX e entrando no XXI está tan firmemente establecida que debe facer parte do noso capital cultural persoal e, desde logo, dos contidos das ensinanzas medias, que é a súa mellor fonte. Nos nosos días está penetrando en terreos novos tanto nas aplicacións (por exemplo, os tan buscados ordenadores cuánticos) coma no básico coa cuantización da gravitación, que é o último reducto clásico. Polo de agora esta tarefa é formal, pero o seu contido é tan fascinante coma a orixe do universo e a dinámica dos buratos negros, da existencia dos cales vaise acumulando evidencia. Polo tanto, convén estarmos atentos, o que é doado na era da información. Na dirección da rede <http://xxx.unizar.es> podemos seleccionar *Quantum Physics* e atoparémolos últimos avances, ás veces de forma alcanzable. Lembremos, para rematar, que Balmer —precursor da Física cuántica coa súa fórmula (4)— era profesor de instituto en Basilea, onde catrocentos anos antes un médico, Paracelso, descubrira o hidróxeno.

BIBLIOGRAFÍA

- 1 Schrödinger, Erwin, *Cursos de la Universidad de Verano de Santander*, 1, Madrid, Signo, 1935, 1-73.
- 2 Pascual, Pedro, e Alberto Galindo, *Mecánica cuántica*, Madrid, Eude-

- ma Universidad, Manuales Eude-
ma, 1989.
- 3 Yndurain, Francisco, *Mecánica
cuántica*, Madrid, Alianza Univer-
sidad Textos, Alianza Editorial,
1988.
- 4 Sánchez Guillén, Joaquín, e Mijail A.
Braun, *Física cuántica*, Ma-
drid, Alianza Universidad Tex-
tos, Alianza Editorial, 1993.

