

El electrón y la probabilidad cuántica

Manuel G. Doncel

Arbor CLVIII, 622 (Octubre), 173-190 pp.

El electrón introduce en la mecánica subatómica el nuevo concepto de probabilidad cuántica. Este artículo estudia el proceso de esta introducción, de 1916 a 1927. Einstein lo ocasionó, al elaborar un formalismo de emisión y absorción de radiación, que Bohr incluyó en su principio de correspondencia, como «probabilidades a priori». Heisenberg las recogió en su mecánica matricial, mientras Schrödinger introducía en su mecánica ondulatoria una función de onda, que Born convirtió en amplitud de probabilidad. Dirac fundamentó esos conceptos de probabilidad con su teoría de transformaciones, y Heisenberg, inspirado en ella, formuló las relaciones de indeterminación de la nueva física subatómica.

Introducción

Con el electrón y el descubrimiento de su mundo subatómico adquiere nuestra física un concepto de probabilidad de enorme transcendencia filosófica. Ya no se trata de la «probabilidad clásica», introducida en la teoría cinética de los gases y en la mecánica estadística decimonónicas. Esta probabilidad expresa nuestra subjetiva ignorancia del detalle microcósmico del sistema físico en cuestión, pero le supone regido por leyes deterministas básicas, que utiliza al menos para definir ciertos «microestados equiprobables». La «probabilidad cuántica» de nuestro siglo se supone objetiva, basada en primeros principios físicos. Filosóficamente puede explicarse mediante ciertas «predisposiciones» de

los elementos más básicos del sistema físico. Ella funda una «causalidad indeterminista», que ha de verse a la raíz de toda legalidad física.

Las primeras ideas sobre esta nueva probabilidad aparecen con el estudio de la radioactividad, a principio de siglo. La experimentación con contadores permitió a Ernest Rutherford y Frederick Soddy (1900) dar una simple ley exponencial, que expresaba la paulatina disminución de la actividad radioactiva de cada sustancia, en función de su «vida media». La emisión de cada partícula α (núcleo de helio), β (electrón) o γ (fotón) supone la desintegración de un átomo radioactivo. Dada la muestra radioactiva, esa ley exponencial fija probabilísticamente cuántos átomos se desintegran espontáneamente, digamos, cada minuto¹. Pero ninguna subestructura nos permite predecir qué átomos serán éstos, ni aun influir para que se desintegren unos más que otros.

Esas ideas probabilísticas son independientes, aunque coetáneas, de las primeras elucubraciones cuánticas de Max Planck (1900), a propósito de su fórmula que daba el espectro de la radiación térmica del cuerpo negro². Establecido el electrón como pieza subatómica y descubierto el núcleo atómico (Rutherford 1911), reaparecerán en el modelo atómico de Niels Bohr (1913)³, y sobre todo, en la nueva mecánica cuántica de Heisenberg (1925), como «probabilidades de transición» del electrón.

El presente artículo pretende recorrer el proceso histórico por el que esos conceptos de «probabilidad cuántica» y «causalidad indeterminista» fueron introduciéndose en la física subatómica. Distinguiré en este proceso tres episodios, a los que dedicaré sendas secciones.

El episodio inicial (1916-1920), correspondiente aún a la física cuántica antigua, fue inaugurado por Einstein, al introducir unos coeficientes de probabilidad A y B , con los que pretendía esconder nuestra ignorancia sobre la emisión y absorción de radiación en el cuerpo negro —una inauguración asociada con el primer malestar («Unbehagen») de Einstein sobre el azar—. Tales coeficientes fueron inmediatamente transformados mediante el principio de correspondencia de Bohr en «probabilidades a priori», que daban cuenta de las transiciones electrónicas de una órbita a otra y, consiguientemente, de las intensidades espectrales. Curiosamente, esta tergiversación bohriana de la idea einsteniana de probabilidad, tuvo lugar al encontrarse por vez primera ambos físicos y entablar una íntima amistad.

El episodio central (1925-1926) coincide con la «fabricación» de la nueva mecánica cuántica. La formulación matricial de Heisenberg —alentada por Pauli— pretendía ciertamente preservar, no sólo las

frecuencias de las líneas espectrales, sino también sus intensidades, que consideraba relacionadas con las «probabilidades de transición teórico-cuánticas» del electrón. La hipótesis implícita de Heisenberg de que esas probabilidades eran dadas por el cuadrado del módulo de los correspondientes elementos de la matriz que representa el operador de posición q , fue muy pronto explícitamente justificada por Pascual Jordan. La formulación alternativa de la mecánica ondulatoria de Schrödinger introducía funciones de onda ψ , como soluciones de su ecuación de valores propios. Tergiversando su interpretación, Max Born reinterpretó estas funciones de onda como amplitudes de probabilidad de presencia del electrón en cada punto del espacio, y generalizó con éxito este formalismo para el caso de colisiones simples.

El episodio final (1927) se originó con la teoría de transformaciones de Dirac, que mostraba la total equivalencia de las formulaciones matricial y ondulatoria de la mecánica cuántica. Esta teoría relacionaba también las diversas concepciones de probabilidad introducidas hasta entonces, mediante la consideración básica de medir, para un mismo estado cuántico, diversos conjuntos completos de observables que conmutan. Y ella inspiró a Heisenberg sus relaciones de indeterminación, e indirectamente a Bohr su principio de complementariedad. Para cerrar nuestro ciclo, Dirac calculó, también en 1927, los coeficientes A y B de Einstein, inaugurando el mundo nuevo de la teoría cuántica de campos.

1. De los coeficientes de emisión y absorción de Einstein al principio de correspondencia de Bohr (1916-1920)

La física del joven Einstein se caracteriza por «sus profundos elementos de tradición», en primer lugar, sobre mecánica estadística ⁴. Así lo había ido mostrando en sus artículos primerizos (1902), en el trabajo revolucionario que introduce el cuanto de luz o fotón (1905), en diversos estudios sobre las fluctuaciones del momento fotónico (1909) y en un curioso trabajo sobre el equivalente fotoquímico (1912) ⁵. En este último estudia procesos químicos, como el de una molécula M que, irradiada por rayos x o rayos γ , absorbe un fotón de la energía apropiada y se descompone en dos: M_1 y M_2 . Éstas podrán recombinarse espontáneamente, emitiendo un fotón de la misma energía. Con estas hipótesis, aplicadas estadísticamente a la interacción entre radiación y materia en el cuerpo negro, obtiene el espectro de la radiación en equilibrio térmico correspondiente a la antigua fórmula de Wien, que

para bajas frecuencias difiere de la de Planck, y se consideraba experimentalmente falsada. Por esto, ya en 1912 Paul Ehrenfest intentaba modificar las hipótesis de Einstein, de forma que el resultado estadístico fuera la fórmula de Planck ⁶.

Pero fue en agosto de 1916 (tras sus logros sobre relatividad general) cuando, como escribía a su amigo Michele Besso, tuvo Einstein una «magnífica iluminación», que le permitía obtener «la deducción de la fórmula de Planck», «puramente cuántica» ⁷. La genial novedad consistía en considerar, no ya dos, sino tres tipos de procesos entre radiación y «átomo» ⁸.

El primer proceso (análogo a la recombinación química anterior) es el de la emisión espontánea de radiación, al pasar un átomo de un estado a otro de energía inferior. Es lo que Einstein denomina «radiación hacia afuera» o «exo-radiación» («Ausstrahlung»), y caracteriza en sus hipótesis estadísticas por el coeficiente A_m^n , que da la probabilidad de transición del estado m al n (siendo $E_m > E_n$), por emisión espontánea de esa exo-radiación. Los otros dos procesos no son espontáneos, sino inducidos por radiación que incide en el átomo. Son los procesos que Einstein llama de «radiación hacia dentro» o «endo-radiación» («Einstrahlung»), cuya probabilidad supone obviamente proporcional a la intensidad ρ de dicha radiación. Pero la originalidad de Einstein consiste en ver en este caso la posibilidad de dos procesos distintos. Imaginando clásicamente el átomo como un cierto oscilador sobre el que actúa radiación de su misma frecuencia, resulta normal pensar que tal oscilador ganará o perderá energía, según que ambas oscilaciones coincidan o se opongan en fase. El proceso cuántico puede pues ser (como en la descomposición química anterior) el de absorción de endo-radiación, o bien el proceso nuevo de emisión inducida por endo-radiación. Einstein expresa la probabilidad de esos dos procesos, mediante ρB_n^m y ρB_m^n respectivamente ($E_m > E_n$). Sin más que formular el equilibrio entre estados atómicos (igualar la probabilidad de transición de m a n mediante los dos procesos de emisión, con la de transición de n a m mediante el de absorción), Einstein obtiene exactamente la fórmula de Planck del espectro de radiación en función de la temperatura. Para ello sólo necesita presuponer la relación básica de Bohr entre frecuencias de radiación y energías atómicas, y establecer una relación nueva entre sus coeficientes A y B ⁹.

Lo importante para nuestro tema es que Einstein hace sus cálculos dentro del cuadro clásico de la estadística de Boltzmann, y no ve estas probabilidades como objetivas y físicamente básicas. Imagina más bien que «las constantes A_m^n y B_m^n podrían ser calculadas directamente,

si poseyésemos una electrodinámica y una mecánica modificadas en el sentido de la hipótesis cuántica». Por otra parte, Einstein indica que, en la emisión espontánea, «la ley estadística adoptada no es otra que la ley de Rutherford de la desintegración radioactiva», y que la probabilidad de los fenómenos inducidos «tiene un valor y un signo que dependen ambos del "azar"». Así lo indica ya en la primera versión, menos conocida, de su artículo, publicada en Berlín el 30 de julio de 1916¹⁰.

En una segunda versión más elaborada del artículo, publicada en Zurich como un mes más tarde, Einstein estudia temáticamente, no sólo las energías de los fotones, sino también la fluctuación de sus momentos, con lo que el fotón adquiere la categoría de partícula, dotada de energía y momento. Este estudio de las fluctuaciones da nueva consistencia a sus hipótesis estadísticas, pero convierte en direccionales los procesos atómicos, tanto los inducidos como los espontáneos. Ello muestra la «debilidad de la teoría» en la que «el tiempo y la dirección de los procesos individuales se dejan al "azar"», contra lo que ocurría en una concepción ondulatoria, en la que el átomo podía emitir ondas esféricas. Einstein concluye profesando su «absoluta confianza en la seguridad del camino emprendido»¹¹. Pero a sus confidentes les confiesa: «siento que la verdadera broma que nos ha gastado aquí el eterno Proponente de adivinanzas, aún no la hemos captado en absoluto. ¿Llegaremos a tener la idea salvadora?»¹².

Esta segunda versión del artículo fue publicada de nuevo el 15 de marzo de 1917 en *Physikalische Zeitschrift*, una de las revistas más prestigiosas de entonces, con lo que entró en la comunidad científica. Sabemos que Bohr estudió en detalle este artículo. El 26 de abril dio una conferencia en Copenhague sobre él, en la que no parece que aludiera siquiera al carácter de esa probabilidad¹³. Pero en 1918 comienza a publicar un nuevo tratadito «Sobre la teoría cuántica de los espectros de líneas». Ya en la introducción alude al artículo de Einstein (en ambas versiones). En la primera parte, «Sobre la teoría general», y en su primer apartado «Principios generales», tras exponer sus dos hipótesis fundamentales sobre los estados estacionarios y las frecuencias de emisión (ver nuestra nota 3), presenta largamente el artículo de Einstein, como basado en esas mismas dos hipótesis, e «introdutor de ciertas hipótesis suplementarias sobre la probabilidad de transición de un sistema entre dos estados estacionarios...». Expone así el sentido de los coeficientes *A* y *B* de Einstein y habla repetidamente de «probabilidades a priori», afirmando por ejemplo que, «a diferencia de lo considerado en la mecánica estadística ordinaria [la de Boltzmann], en la teoría cuántica no disponemos de ningún medio directo de de-

terminar estas probabilidades a priori, porque no tenemos información detallada sobre el mecanismo de transición entre los distintos estados estacionarios». Concluye la primera parte anunciando reglas concretas que le permitirán obtener, al menos en el límite de diferencias pequeñas entre grandes números cuánticos, las probabilidades de transición y las intensidades de las líneas espectrales, por analogía con los diferentes términos de la serie de Fourier que dan clásicamente las intensidades de los diversos armónicos. En la segunda parte, «Sobre el espectro del hidrógeno», desarrolla estas reglas en el caso de las intensidades de las rayas obtenidas por el efecto Stark ¹⁴.

Ése será el tema central de la tesis doctoral que, bajo la dirección de Bohr, publica Hendrik A. Kramers en 1919. Kramers explica en ella cómo «ha sido necesario introducir en la teoría cuántica la noción de «probabilidad a priori de transición espontánea» entre dos estados estacionarios... utilizada por Einstein en su explicación de la ley de radiación térmica», y cómo «una medida de esta probabilidad a priori de transición espontánea es dada por la cantidad A , introducida por Einstein». Tras elaborar en todo detalle los cálculos del efecto Stark para las cuatro líneas fundamentales del hidrógeno, compara sus resultados con los experimentales. La concordancia no es muy espectacular, pero permite concluir a Kramers que «las consideraciones de Bohr ofrecen una base sólida para futuros desarrollos de la teoría de intensidades de las líneas espectrales» ¹⁵.

En un trabajo de 1920, «Sobre las series espectrales de los elementos», Bohr introduce su «principio de correspondencia». Tal principio tenía un aspecto justificativo, frente a lo revolucionario de las hipótesis que basan el cálculo de las frecuencias espectrales del átomo de hidrógeno; aspecto que, sin darle este nombre, había ya indicado en su trilogía de 1913. Ahora le añade un nuevo aspecto eurístico, que permite calcular las intensidades de esas mismas líneas espectrales. Ambos aspectos de la correspondencia clásico-cuántica deberían ser válidos sólo para el caso de números cuánticos grandes. Pero el pretendido éxito de la contrastación experimental realizada por Kramers sobre el efecto Stark del hidrógeno (que corresponde a números cuánticos muy pequeños) parece hacerle olvidar el carácter asintótico de su teoría de intensidades. Las «probabilidades a priori» aparecen así, junto a las hipótesis de cuantificación, como algo básico de la nueva teoría atómica, globalmente justificado en su «correspondencia» con la física clásica ¹⁶.

Este carácter básico que Bohr atribuye a la probabilidad cuántica ciertamente tergiversa el carácter que Einstein atribuía en su artículo

a los coeficientes A y B , y curiosamente parece imponerse bajo la autoridad de Einstein. Pero aún resulta más curioso que el principio de correspondencia se introdujese en presencia de Einstein, y de momento la tergiversación quede como inadvertida por éste. En efecto, el artículo de Bohr que acabamos de comentar, constituye la versión publicada de una solemne conferencia que éste dio en Berlín el 27 de abril de 1920, en presencia de Einstein. Es en esta ocasión que ambos físicos se encontrarán por vez primera, y Einstein, lejos de sospechar ninguna tergiversación, sólo quedó profundamente impresionado por la vivacidad del pensamiento de Bohr ¹⁷.

2. De la mecánica matricial de Heisenberg a las probabilidades de colisión de Born (1925-26)

Werner Heisenberg, antiguo alumno de Sommerfeld en Munich, era ayudante de Born en Gotinga y visitante de Bohr en Copenhague. En su intento con Born de atacar la cuantificación del átomo de helio con las técnicas de Bohr y Sommerfeld, había fracasado. Las perturbaciones entre las dos órbitas electrónicas, que los estudios de mecánica planetaria obligaban a distinguir en seculares y temporales ¹⁸, resultaban cuánticamente insuperables. En cambio, colaborando con Kramers, había elaborado una fórmula de dispersión, en la que sólo intervenían las frecuencias de emisión o absorción, y que resultaba experimentalmente corroborada.

Se entiende que a Heisenberg no le satisfacía el realismo de esas órbitas de Bohr, exquisitamente elaboradas por su maestro Sommerfeld. Por otra parte su familiaridad con los espectros atómicos, le hacía considerar como reales los «términos espectrales» (o niveles de energía del átomo divididos por la constante de Planck) que, según la hipótesis de Bohr, dan por simple diferencia las frecuencias de las líneas espectrales. Pero también eran para él reales las intensidades de esas líneas que, según las teorías de Einstein y Bohr, vienen dadas por ciertas probabilidades de emisión y absorción de fotones, asociadas a la transición del electrón. Por eso, en su artículo «muy místico» de julio de 1925 que introduce la mecánica matricial, hace desaparecer las órbitas electrónicas, e introduce una nueva cinemática en la que, por ejemplo, la posición del electrón queda descrita por una matriz que registra el conjunto de sus posibles transiciones, con las frecuencias fotónicas y las amplitudes de probabilidad correspondientes a cada una de ellas ¹⁹.

En realidad, en ese artículo de Heisenberg no queda totalmente explícita la hipótesis de que las amplitudes de probabilidad de transición corresponden a la matriz que representa la posición del electrón. En ausencia de Heisenberg, su jefe de departamento Born y su compañero Pascual Jordan lograron interpretar su artículo muy místico, como álgebra de matrices. En especial, lograron formular matricialmente un importante principio de cuantificación; en esta formulación quedaba claro que el producto de matrices, en concreto de las matrices \mathbf{q} y \mathbf{p} que representan respectivamente la posición y el momento del electrón, no es conmutativo²⁰. Postulan explícitamente que son los elementos de la matriz de posición \mathbf{q} , los que fijan la amplitud de probabilidad de transición entre los estados correspondientes a su fila y su columna. Jordan logrará incluso justificarlo, introduciendo para ello una primera representación cuántica del campo electromagnético²¹. La hipótesis implícita de Heisenberg recibe así una formulación precisa y hasta una justificación de correspondencia clásico-cuántica.

Born, Heisenberg y Jordan redactan conjuntamente a finales de 1925 un tercer artículo de mecánica matricial, tradicionalmente denominado «de los tres hombres». Según lo expresará posteriormente Heisenberg, en este artículo «el elemento estadístico de la mecánica cuántica juega un papel esencial»²². Por otra parte, esta formulación matricial pretende incluir en su mismo núcleo el principio de correspondencia de Bohr. Veamos cómo lo expresa Heisenberg, en el capítulo introductorio, redactado por él: «Otra consecuencia de esta semejanza de la nueva teoría con la clásica, es que ya no puede hablarse de un principio de correspondencia independiente, añadido a esta teoría; más bien, la teoría misma puede considerarse como la formulación exacta del pensamiento de correspondencia de Bohr»²³. Así es como la probabilidad cuántica penetra la nueva teoría. No obstante el problema de calcular esas amplitudes de probabilidad para el caso más sencillo, el del átomo de hidrógeno, resulta de momento insoluble, tanto para Heisenberg como para su brillante confidente Wolfgang Pauli²⁴.

El artículo de los tres hombres aparecerá en *Zeitschrift für Physik* a principios de 1926. Los primeros meses de ese mismo año irán apareciendo en *Annalen der Physik* cuatro comunicaciones del profesor de Zurich Erwin Schrödinger, tituladas «Cuantificación como problema de valores propios»²⁵. Ellas fundan el enfoque ondulatorio de la nueva mecánica cuántica. La famosa ecuación de Schrödinger da la posición del electrón atómico como «función de onda», o función propia de un operador hamiltoniano, correspondiente a un cierto valor propio de la energía del estado estacionario. En la cuarta de las comunicaciones

se introduce una ecuación de Schrödinger más general, que permite estudiar la evolución del sistema en función del tiempo. Pero Schrödinger no comparte la concepción probabilista de la mecánica cuántica, e interpreta su función de onda como amplitud de un electrón extendido por el espacio, cuyo módulo cuadrado da la densidad de carga eléctrica en cada punto. Con esto, el formalismo y la visualización de su mecánica aparecían como tradicionales y clásicos, en contraposición a los de la mecánica matricial.

Schrödinger mismo, sin embargo, publica en marzo de 1926, tras sus dos primeras comunicaciones, otro trabajo importante: «Sobre la relación de la mecánica cuántica de Heisenberg-Born-Jordan con la mía»²⁶. La equivalencia parcial de ambos enfoques cuánticos (en ninguno de ellos se dan todavía reglas dinámicas de evolución), se reduce a mostrar que las funciones de onda de Schrödinger permiten obtener, por integración en el espacio, los elementos de la matriz de Heisenberg de un observable cualquiera. Lo interesante para nuestro tema es que en su comunicación tercera, inmediatamente posterior a este artículo, Schrödinger utiliza esta equivalencia parcial para calcular los elementos de la matriz de posición que, según la hipótesis de Heisenberg justificada por Jordan, dan las probabilidades de transición del electrón, y las intensidades de las líneas espectrales. Aplica en concreto su cálculo a las líneas del espectro del hidrógeno descompuestas por efecto Stark. Corrige así, en el cuadro de la nueva mecánica cuántica, las intensidades que había obtenido Kramers a partir del principio de correspondencia, comprobando que el ajuste experimental es mejor.

La concepción anti-probabilista de Schrödinger es solemnemente defendida por éste en el verano de 1926 en la Universidad de Munich. Allí había sido invitado a dar dos conferencias por Sommerfeld, en cuya escuela se habían formado Pauli y Heisenberg, y por el famoso Wilhelm Wien, que a la sazón actuaba de Rector de la Universidad. Heisenberg, que asistió casualmente a esas conferencias, es el único que se atrevió a oponerse a esa interpretación de Schrödinger y, según sus recuerdos, Wien «casi me expulsó de la sala»²⁷. Las discusiones continuarán en el otoño en Copenhague, a donde acudirán ambos, Schrödinger y Heisenberg, como invitados de Bohr. Son famosas las protestas de Schrödinger, que se arrepiente de sus contribuciones a este tema, si ellas van a servir para defender esa «saltaduría cuántica»²⁸. También Jordan escribirá cartas agresivas a Schrödinger, de las que no tendrá más remedio que disculparse. El anfitrión, Bohr, defiende evidentemente la concepción probabilista de Heisenberg, que consagraba formalmente el principio de correspondencia con sus «probabilidades a priori».

Pero esta discusión no se circunscribe a Copenhague. El verano de ese mismo año 1926, el otro de los tres hombres, Max Born, hace desde Gotinga una importante aportación a la nueva física cuántica y en especial a nuestro tema de su interpretación probabilista. Esta aportación resulta bien conocida, por haber sido galardonada, aunque muy tardíamente, con el premio Nobel de física²⁹. Ella consiste en aplicar la ecuación de Schrödinger que da la evolución dinámica en el tiempo (cuarta comunicación), no ya al electrón de un átomo, sino a una pareja de partículas elementales, que pueden sufrir una colisión elástica. Con ello, las probabilidades de transición de un estado estacionario a otro, se transforman en probabilidades de transición de un estado de partículas libres con energías y momentos dados a otro. Es en este contexto que Max Born asevera: «Las trayectorias de estos corpúsculos sólo están determinadas en cuanto las limitan los principios de conservación de energía y momento; fuera de eso, existe únicamente una probabilidad de tomar cierta trayectoria, probabilidad que viene determinada por los valores de la función [de onda]». Y, jugando con la interpretación estadística de la función de onda y el carácter determinista de la ecuación de Schrödinger a la que obedece, concluye: «Este hecho paradójico podría resumirse así: el movimiento de las partículas sigue una ley de probabilidad, pero la probabilidad misma se propaga de acuerdo con una ley causal»³⁰. Estos trabajos de Max Born, pensados desde la concepción ondulatoria de Schrödinger, consagraban la función de onda como amplitud de probabilidad.

3. De la teoría de transformaciones de Dirac a las relaciones de indeterminación de Heisenberg (1927)

Hemos calificado de parcial a la equivalencia entre ambas mecánicas cuánticas, matricial y ondulatoria, que razonaba Schrödinger en su artículo de marzo de 1926. La equivalencia total nos la dará la llamada «teoría de transformaciones» que formulará Paul A. M. Dirac en su primer artículo de 1927 (e independientemente Jordan, aunque de modo más abstracto y confuso). Esta teoría de transformaciones se convertirá muy pronto en el núcleo básico de la nueva formulación cuántica, por lo que hoy nos resulta difícil concebirla como una adquisición cuántica ulterior.

Pero pensemos que las matrices de Heisenberg de 1926, tenían sus filas y columnas necesariamente etiquetadas por valores de energía, correspondientes a los estados estacionarios de un átomo (de forma

que sus elementos encerraban información sobre las frecuencias y las probabilidades de transición entre dos de esos estados). Por otra parte las funciones de onda de Schrödinger eran necesariamente funciones del espacio-tiempo, etiquetadas por los posibles valores de energía de los estados estacionarios. Dirac, con su visión general, representa los estados de un sistema, no ya como funciones de onda de nuestro espacio-tiempo concreto, sino como vectores complejos de un gran espacio abstracto, que hoy llamamos «espacio de Hilbert». Introduce además la noción de «conjunto completo de observables que conmutan», o sea, de totalidad de magnitudes que podemos medir a la vez sobre el sistema. Y a cada uno de estos conjuntos completos le asocia un referencial del gran espacio de Hilbert, de forma que los vectores que constituyen el referencial representen estados con medidas precisas de cada uno de los observables del conjunto completo³¹. El paso de unos referenciales a otros viene dado por ciertas transformaciones unitarias, que son las que dan nombre a la teoría. Desde esta visión general de la teoría de transformaciones, las matrices introducidas por Heisenberg son representaciones de los observables en un referencial muy particular, el asociado al observable energía (y a los otros observables del conjunto completo que se irán descubriendo necesarios para fijar los estados, eliminando toda «degeneración»). Y la ecuación de Schrödinger utiliza la transformación que pasa de la representación de espacio-tiempo a esa representación de energía (para «diagonalizar» el operador hamiltoniano). Esto permite demostrar la equivalencia total de ambas concepciones cuánticas.

Pero veamos ya, cómo plantea Dirac el concepto de probabilidad cuántica, desde su generalísima teoría de transformaciones. La pregunta básica viene a ser: Si suponemos que un sistema cuántico está en un estado al que corresponden medidas concretas de un conjunto completo de observables R_1 , ¿qué probabilidad hay de que al medir otro conjunto completo de observables R_2 resulten unos valores concretos dados? El estado estará representado por un cierto vector \mathbf{v}_1 del referencial asociado a R_1 , y se pregunta por la probabilidad de que las medidas del conjunto de observables R_2 sean las que ciertamente tiene el estado representado por un cierto vector \mathbf{v}_2 del referencial asociado a R_2 . La respuesta general es que la amplitud de esa probabilidad viene dada por el producto escalar de \mathbf{v}_1 y \mathbf{v}_2 , y la probabilidad por el módulo cuadrado de ese producto. Tales amplitudes de probabilidad constituyen los elementos de la matriz unitaria de transformación que pasa de un referencial a otro. Dirac muestra que esta concepción general de la probabilidad cuántica recoge las anteriormente postuladas por

los elementos de matriz de Heisenberg y por las funciones de onda de Born ³².

Durante el invierno de 1926-27 Heisenberg, visitante en Copenhague, mantuvo largas conversaciones con Bohr, tras la partida de Schrödinger y la llegada de Dirac, que publicó su teoría de transformaciones estando también allí de visitante. Tema de reflexión y discusión de Heisenberg debió ser, junto al de la interpretación estadística de la mecánica cuántica, el de la medida simultánea de magnitudes canónico-conjugadas como la posición q y el momento p ³³. Es curiosa una carta que, a instancias de Heisenberg, les había escrito Pauli desde Hamburgo en octubre, y que en Copenhague fueron devorando Heisenberg, Bohr, Dirac y Hund. En su estilo, también muy místico, trata Pauli de ambos temas y concluye así uno de sus párrafos famosos: «Se puede contemplar el mundo con el ojo- p y se le puede contemplar con el ojo- q , pero si se quiere abrir los dos ojos a la vez, se vuelve uno loco» ³⁴.

Mientras Bohr estaba de vacaciones esquiando, y tras consultarlo con Pauli, Heisenberg decide publicar un artículo sobre estos temas quasi-filosóficos. Para él la imposibilidad de medir a la vez con precisión dos magnitudes canónico-conjugadas, es un problema experimental, inherente a la medida, y que desde el análisis de esta medida puede formularse matemáticamente. Tal imposibilidad permite la formulación teórica de la física cuántica, de la misma manera que la no transmisión de información a velocidad superior a la de la luz, permite la formulación teórica de la física relativista ³⁵.

Heisenberg rechaza vigorosamente un determinismo laplaciano. Según éste, si una mente privilegiada pudiera conocer las posiciones y velocidades de todas las partículas del universo en un momento dado, y las fuerzas que actúan entre ellas, conocería todo el futuro (y aun todo el pasado) del universo. Para Heisenberg, «resulta falsa, no la consecuencia, sino la premisa: *no podemos* por principio conocer en todos sus detalles el presente». El mismo Heisenberg formula también la dificultad: «podría llegarse a sospechar que debajo del mundo estadístico que percibimos se esconde todavía un mundo verdadero, en el que la ley causal es válida». Y da esta respuesta: «tales especulaciones... nos parecen infructuosas y sin sentido. La física debe describir formalmente las relaciones entre las percepciones. Más bien la verdadera situación puede caracterizarse mucho mejor así: puesto que todas las experiencias están sometidas a las leyes de la mecánica cuántica y por tanto a [la relación de imprecisión de la nota 35], la mecánica cuántica establece definitivamente la invalidez de la ley causal» ³⁶.

Se comprende que Bohr, al volver de sus vacaciones de esquí y encontrarse las pruebas de imprenta del artículo de Heisenberg, se sintiera crítico ante él³⁷. Su elaboración filosófica ulterior, conocida como «principio de complementariedad», tiene un marcado carácter epistemológico. Para él, la correspondencia entre observables de espacio-tiempo y de momento-energía, no es simétrica. Los primeros corresponden a la observación, y los segundos a la definición del sistema. Por eso, la mecánica cuántica no es como la newtoniana en la que, por ejemplo, a partir de una definición precisa del sistema planetario podemos predecir un eclipse, cuya observación en nada perturbará la definición del sistema³⁸.

Dirac cierra nuestro ciclo, al calcular en su segundo artículo de 1927 los coeficientes *A* y *B* de Einstein. En la nueva mecánica cuántica sólo era posible calcular coeficientes de tipo *B*, por ejemplo con la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (cuarta comunicación), representando mediante un cierto potencial el campo inductor, y estudiando la evolución del sistema bajo su influjo. La emisión espontánea correspondiente al coeficiente tipo *A* sólo podía obtenerse apoyándose en la expresión de Einstein que relaciona los coeficientes *A* y *B*. Pero Dirac logra ahora calcularlos explícitamente, y reencuentra la relación entre ambos dada por Einstein. Para ello ha de ampliar la interpretación estadística de la función de onda. Y para describir el campo electromagnético, ha de introducir nuevas relaciones de conmutación entre los operadores de creación y aniquilación de fotones (segunda cuantificación), y describir a estos con su estadística bosónica³⁹. Este artículo inaugura pues la teoría cuántica de campos, teoría que sufrirá varias crisis hasta implantarse la QED después de la guerra⁴⁰.

Conclusión

La elaboración de la probabilidad cuántica y la causalidad indeterminista constituye pues una larga empresa colectiva, en la que aparecen perdedores, como Einstein y Schrödinger, y ganadores, como Bohr, Heisenberg, Pauli, Jordan, Born y Dirac. Pero tal empresa, de carácter microsociológico, estuvo muy alejada de las preocupaciones sociales de la república de Weimar⁴¹.

Notas

¹ La ley de Rutherford y Soddy (1900 y 1902), que da la población de átomos aún no desintegrados, *N*, en función del tiempo, *t*, es

$$N = N_0 e^{-\lambda t},$$

siendo N_0 la población inicial, y $1/\lambda$ el tiempo en que la población se reduce en un factor $e = 2,718\dots$. Este tiempo coincide con la «vida media» que le espera a cada átomo antes de desintegrarse.

² El cuerpo negro hemos de imaginarlo como una cavidad con una entrada pequeña, de forma que toda radiación electromagnética que penetre en ella sea absorbida. El espectro de frecuencias, o distribución de la densidad de radiación, ρ , para cada frecuencia, ν , no depende de la materia de la cavidad sino exclusivamente de la temperatura absoluta, T , a la que se establece el equilibrio entre radiación y materia. La fórmula de Planck (1900) es

$$\rho = \alpha \nu^3 / (e^{h\nu/kT} - 1), \quad \alpha = 8\pi h/c^3,$$

siendo h el cuanto de acción de Planck, y k la constante de entropía de Boltzmann. Esta fórmula fue sugerida por resultados experimentales con rayos infrarrojos ($\nu/T \ll k/h$) que discrepaban de la anterior fórmula de Wien

$$\rho = \alpha \nu^3 e^{-h\nu/kT}$$

con la que coincide en el límite de altas frecuencias ($\nu/T \gg k/h$). Planck la justificó, desde finales de 1900, con argumentos que cabe juzgar como anteriores al paradigma cuántico (KUHN 1978; y 1976, p. 197, nota 5).

³ BOHR cuantifica el átomo, suponiendo en él órbitas estables de energías $E_1, E_2\dots$. Y supone que, al pasar el electrón de una órbita m a otra n , de menor energía, emite luz de frecuencia ν , tal que

$$h\nu = E_m - E_n.$$

⁴ Así lo recuerda J. Robert Oppenheimer en una ocasión solemne: Congreso de 1965 en París, pp. 8-9.

⁵ Sobre estos trabajos de Einstein, especialmente sus estudios de las fluctuaciones, véanse BERGIA y NAVARRO 1988 y PAÍS 1982. Sobre el equivalente fotoquímico, véase la nota editorial en EINSTEIN CP4, pp. 109-112.

⁶ Cartas entre Ehrenfest y Einstein de abril de 1912, en EINSTEIN CP5, pp. 442-444 y 451. Sobre las fórmulas de Wien y Planck, y sobre la motivación experimental de ésta última, véase la nota 2.

⁷ Cartas de EINSTEIN a BESSO de 11 y 24 agosto 1916, *Correspondencia*, n. 23 y 24, a aparecer en EINSTEIN CP8.

⁸ Einstein, curiosamente, sigue hablando de «molécula», pero es evidente que tiene ante los ojos el modelo atómico de Bohr, que ha conocido a través de su amigo Sommerfeld. Véanse las cartas de Einstein a Sommerfeld de 8 febrero y 3 agosto 1916, *Correspondencia* n. 6 y 7, a aparecer en Einstein CP8.

⁹ Obtiene la fórmula de Planck dada en la nota 2 (con el término -1 , correspondiente al fenómeno de la emisión inducida). Pero en el exponente, en vez de $h\nu$ obtiene $E_m - E_n$ (véase la relación de Bohr en la nota 3), y en el numerador, en vez de $\alpha \nu^3$ obtiene el cociente A_m^n / B_m^n . Esta relación de Einstein entre las probabilidades de los fenómenos espontáneos e inducidos resultará fecunda, tanto en la física cuántica antigua como en la nueva.

¹⁰ EINSTEIN 1916j, pp. 319 y 322, reproducido en EINSTEIN CP6, pp. 363-370. Esta versión indica mejor los antecedentes históricos de su pensamiento, especialmente su teoría fotoquímica.

¹¹ EINSTEIN 1916n, p. 61, críticamente reproducido en EINSTEIN CP6, pp. 381-398.

¹² Carta de EINSTEIN a BESSO, 9 marzo 1917, *Correspondencia*, n. 30, a aparecer en EINSTEIN CP8.

¹³ Se conserva lo que sin duda fue la pauta de esta conferencia: tres páginas autógrafas en danés, datadas, y tituladas «Einsteins nye Straalinsteori (Phys. Zeitsch. Nr. 6, 1917)». En ellas aparece una sola vez y de pasada el término «probabilidad». AHQP, BSC.

¹⁴ BOHR CW3, doc. 3, pp. 4-9, 36 y 69-79. El efecto Stark se obtiene sometiendo el átomo cuyo espectro se quiere estudiar a un campo electrostático, con lo que cada una de sus líneas se descompone en dos multipletes con polarizaciones ortogonales. Las reglas de Bohr permiten calcular, para el caso del hidrógeno, las intensidades relativas de las líneas de esos dos multipletes.

¹⁵ KRAMERS 1919, pp. 326 y 384.

¹⁶ BOHR CW3, doc. 9, pp. 27-36.

¹⁷ Ver la carta de Einstein a Bohr, en BOHR, CW 3, p. 22. Parece que los síntomas de discrepancia entre ambos se iniciaron en una ulterior visita de Einstein a Copenhague y, como es sabido, explotarán en el congreso Solvay de 1927.

¹⁸ HEISENBERG alude a sus estudios de la Mecánica Celeste de Poincaré sobre este punto.

¹⁹ HEISENBERG 1925. El calificativo de «muy místico» lo utiliza BORN en carta a EINSTEIN del 17 julio 1925 (*Correspondencia*, n. 49, p. 121), aludiendo al menos parcialmente a ese artículo. Piénsese que Heisenberg introduce en él productos matriciales, ¡sin saber lo que son las matrices!

²⁰ La conocida expresión matricial del principio de cuantificación es

$$pq - qp = h/2\pi i \mathbf{1},$$

siendo h la constante de Planck, i la raíz de -1 , y $\mathbf{1}$ la matriz unidad (Born y Jordan 1925, p. 871).

²¹ BORN y JORDAN 1925, pp. 866 y 883-888. Jordan redacta esta última parte del artículo: «Capítulo IV. Observaciones sobre electrodinámica». En ella da una representación matricial del campo electromagnético (segunda cuantificación) y demuestra que la intensidad del campo espontáneamente emitido en esa transición resulta proporcional al momento dipolar del electrón, fijado por esos elementos de matriz de posición.

²² HEISENBERG 1927, nota 3.

²³ BORN, HEISENBERG y JORDAN 1926, p. 558.

²⁴ Citemos como anécdota que HEISENBERG, condecorador de los esfuerzos inútiles de PAULI en este sentido, le deseará en una felicitación navideña: «¡un feliz año nuevo [1926], lleno de probabilidades de transición!» (carta a Pauli, 24 diciembre 1925, *Correspondencia* de PAULI, n. 112).

²⁵ SCHRÖDINGER 1926 a, b, d, e.

²⁶ SCHRÖDINGER 1926 c.

²⁷ Carta de HEISENBERG a PAULI, 28 julio 1926, e interview de HEISENBERG en AHQP (ver *Correspondencia* de PAULI, n. 142, e introducción precedente, p. 336).

²⁸ «Quantumspringerei», aludiendo al salto cuántico producido al hacer una medida reduciendo el paquete de ondas (por ejemplo, al medir la posición del electrón, su función de onda, definida por todo el espacio, se reduce a un punto).

²⁹ En 1933 se concederán simultáneamente los premios Nobel de los dos últimos años: el de 1932 a HEISENBERG, el de 1933 compartido entre SCHRÖDINGER y DIRAC. Como escribirá HEISENBERG al enterarse, «cualquiera de estos dos hubiera merecido el premio entero y él, en cambio, hubiera podido compartirlo con Max Born». Éste

compartirá el premio Nobel de 1954, «por sus investigaciones básicas en mecánica cuántica, especialmente por su interpretación estadística».

³⁰ BORN 1926b, p. 804. Un artículo preliminar, BORN 1926a, insistía aún más en esta interpretación estadística.

³¹ Un conjunto de medidas (los valores propios del conjunto de observables) etiqueta un determinado estado (vector propio de todos ellos). Los estados etiquetados por distintos conjuntos de medidas resultan ortogonales, por lo que pueden usarse como vectores de base que constituyen un referencial.

³² Véase DIRAC 1927a, pp. 639-641.

³³ Sobre la interpretación estadística, HEISENBERG 1927, nota 3 menciona las formulaciones de Einstein, Pauli, Born y Dirac.

³⁴ Carta de PAULI a HEISENBERG, 19 octubre 1926, *Correspondencia* de PAULI, n. 143, p. 347. Es una de las pocas cartas a HEISENBERG de esta época que se conservan. La mayor parte ardieron durante la guerra en Leipzig. Ésta, por su interés, se conservó en Copenhague.

³⁵ La famosa «relación de imprecisión» de HEISENBERG, para el caso de posición y momento, se escribe

$$\Delta p \Delta q \cong h,$$

siendo Δp y Δq las imprecisiones en la medida del momento y la posición, por ejemplo de un electrón, y h la constante de Planck (HEISENBERG 1927, p. 175). La imprecisión impuesta por esta ecuación permite la validez del principio de cuantificación de la nota 20 (*ibidem*, p. 180).

³⁶ *Ibidem*, p. 197. Nótese que «causal» designa causalidad determinista.

³⁷ Este tono crítico aparece claro en la nota final que le obligó a añadir en la corrección de pruebas (*ibidem*).

³⁸ Véase su comunicación al *Congreso* de Como en setiembre de 1927. Aunque el texto de esta comunicación fue profundamente retocado para las actas.

³⁹ DIRAC 1927b.

⁴⁰ Bajo una de esas crisis, DIRAC mismo propondrá el abandono de esta segunda cuantificación, seguro de que «la mayor parte de los físicos estarán muy contentos de ver su fin» (DIRAC 1936, p. 804).

⁴¹ Otra es la famosa tesis de Paul Forman (FORMAN 1971), recientemente matizada (MEYENN 1994).

Bibliografía

- BERGLIA, S. y NAVARRO, Luis (1988): «Recurrences and Continuity in Einstein's Research on Radiation between 1905 and 1916», *AHES*, 38, 79-99.
- BOHR, Niels (1918): *On the Quantum Theory of Line Spectra*, Part I.
- (1920): *On the Series Spectra of the Elements* (Translation).
- CW: *Collected Works*, L. Rosenfeld (G. Ed.), North-Holland, Amsterdam.
- BORN, Max (1926a): «Zur Quantenmechanik der Stossvorgänge», *Z. Phys.*, 37, 863-867 (AA1, doc. 56).
- (1926b): «Quantenmechanik der Stossvorgänge», *Z. Phys.*, 38, 803-827 (AA1, doc. 57).

- AA: *Ausgewählte Abhandlungen*, 2 vols., Akademie der Wissenschaften, Vandenhoeck, Göttingen 1963.
- BORN, Max y JORDAN, Pascual (1925): «Zur Quantenmechanik», *Z. Phys.*, 34, 858-872 (AA1, doc. 53).
- BORN, HEISENBERG y JORDAN (1926): «Zur Quantenmechanik II», *Z. Phys.*, 35, 557-615 (AA1, doc. 54).

Congresos

- (1927 Como) *Atti del Congresso Internazionale dei Fisici*. Nicola Zanichelli (ed.), Bologna 1928.
- (1965 Paris) *Science and Synthesis: Unesco, Tenth Anniversary of the Death of Albert Einstein and Teilhard de Chardin*. Springer V., Berlin 1971.

Correspondencia

- EINSTEIN-BORN, Max Born (ed.). Nymphenburger V., München 1969.
- EINSTEIN-BORN, Pierre Speziali (ed.). Hermann, Paris 1972.
- EINSTEIN-SOMMERFELD, Armin Hermann (ed.). Schwabe, Basel 1968.
- PAULI, vol. I, A. Hermann, K. v. Meyenn, V. F. Weisskopf (eds.). Springer, Heidelberg 1979.
- DIRAC, Paul A. M. (1927a): «The physical interpretation of the quantum dynamics», *P. R. S.*, 113, pp. 621-641 (CW 1927:2).
- (1927b): «The quantum theory of emission and absorption of radiation». *P. R. S.*, 114, pp. 243-265 (CW 1927:3).
- (1936): «Does Conservation of Energy Hold in Atomic Processes?» *Nature*, 137, 298-299 (CW 1936: 1).
- CW: *The Collected Works of P. A. M. Dirac*, R. H. Dalitz (ed.). Cambridge U. P. 1995.
- EINSTEIN, Albert (1916j): «Emission and Absorption of Radiation in Quantum Theory *Deutsche Phys. Ges., Verhandlungen*, 18, 318-323 (CP6, doc. 34).
- (1916n): «On the Quantum Theory of Radiation», *Phys. Ges. Zürich, Mitteilungen*, 18, 47-62. Reimpreso en *Phys. Zeitschrift*, 18 (1917). 121-128 (CP3, doc. 38).
- CP1-7: *The Collected Papers of Albert Einstein*. Princeton U. P.
- FORMAN, Paul (1971): *Weimarer Kultur, Kausalität und Quantentheorie 1918-1927*. Trad. castellana con introducción y apéndices bibliográficos: *Cultura en Weimar, causalidad y teoría cuántica*, J. M. Sánchez Ron (ed.). Alianza Editorial, Madrid 1984.
- HEISENBERG, Werner (1925): «Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen», *Z. Phys.*, 33, 879-893 (CW, A1, G3, 1925/3).
- (1927): «Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik», *Z. Phys.*, 43, 172-198 (CW, A1, G3, 1927).
- CW, A1: *Collected Works: Original Scientific Papers*, W. Blum, H.-P. Dürr y H. Rechenberg (eds.). Springer, Berlin 1985.
- KRAMERS, Hendrik A. (1919) «Intensities of Spectral Lines», *D. K. D., Videnskaberne Selskabs Skrifter O. R. N. O. M. A.*, 3, 285-388.
- KUHN, Thomas S. (1976): «Theory-Change as Structure-Change: Comments on the Sneed Formalism», *Erkenntnis* 10, 179-199.
- (1978): *Black-Body Theory and the Quantum Discontinuity*. Oxford U. P.

- MEYENN, Karl von (1994): *Quantenmechanik und Weimarer Republik*. Vieweg, Braunschweig.
- PAIS, Abraham (1982): 'Subtle is the Lord...' *The Science and the Life of Albert Einstein*. Oxford U. P.
- SCHRÖDINGER, Erwin (1926a,b,d,e): «Quantisierung als Eigenwertproblem», *Mitteilungen* 1.-4.: *Ann. d. Phys.*, 79, 361-376 y 489-527; 80, 437-490; 81, 109-139.
- (1926c): «Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen», *Ann. d. Phys.*, 79, 734-756.
- AHQP: Archive for History of Quantum Physics.
- BSC: Bohr Scientific Correspondence.