Fundamentos cuánticos de la estructura de la materia

La colección Docencia tiene como función principal la de presentar publicaciones destinadas a la enseñanza universitaria, en todos los campos del saber, que se fundamenten en los resultados de estudios recientes para conformar un corpus de consulta acorde a las necesidades formativas actuales, para así constituir una biblioteca básica para docentes y discentes.

Comité científico de la colección

Dirección
Jon Igelmo Zaldívar
Universidad Complutense de Madrid, España

Esther Jiménez Pablo
Universidad Complutense de Madrid, España

Secretaría
Laura Camas Garrido
Universidad Complutense de Madrid, España

Asesoría
Adolfo Alonso Arroyo
Universidad de Valencia, España

Noemí Ávila Valdés
Universidad Complutense de Madrid, España

David Carabantes Alarcón
Universidad Complutense de Madrid, España

María Pilar da Silva de Campos
Universidad Autónoma de Madrid, España

María Rocío Guede Cid
Universidad Rey Juan Carlos, España

María Linacero de la Fuente
Universidad Complutense de Madrid, España

Julián José Lozano Navarro
Universidad de Granada, España

Eduardo Torres Corominas
Universidad de Jaén, España

Fundamentos cuánticos de la estructura de la materia

Óscar Moreno Díaz

PRIMERA EDICIÓN: ABRIL 2025

© 2025, Óscar Moreno Díaz
© 2025, Ediciones Complutense
Pabellón de Gobierno
Isaac Peral s/n
28015 Madrid
913 941127
info.ediciones@ucm.es
www.ucm.es/ediciones-complutense

ISBN: 978-84-669-3891-4
Depósito Legal: M-89-2025

Diseño de cubiertas de la colección: Koln Studio

Imagen de cubierta: *Circles in a circle*, Kandinsky. Philadelphia Museum of Art.

Todos los recursos gráficos y tablas contenidos en esta publicación han sido elaborados por el autor.

Impresión
Masquelibros
Pol. Ind. Los Olivares
Beas de Segura, 29
23009 Jaén

Ediciones Complutense es miembro de Unión de Editoriales Universitarias Españolas (UNE) y está asociado a Cedro.

Ediciones Complutense garantiza un riguroso proceso de selección y evaluación de los trabajos que publica.

Reservados todos los derechos. Queda prohibida la reproducción total o parcial de esta publicación, por cualquier medio o procedimiento, sin contar para ello con la autorización previa, expresa y por escrito del editor.

Printed in Spain

Índice

Prólogo **11**

1. Introducción **15**

1.1. Cuantos de energía y dualidad onda-partícula 15
1.2. Desarrollo histórico de los marcos teóricos de la mecánica 17
1.3. Relación entre espacio y momento, tiempo y energía 21
1.4. Relación entre espacio y tiempo: relatividad especial 22
1.5. Energía 23
1.6. Las estructuras microscópicas de la materia 25
1.7. Estudio experimental de las estructuras de la materia 28
1.8. Constantes y unidades habituales en física microscópica 31

2. Formalismo matemático de la mecánica cuántica **35**

2.1. Espacio de Hilbert y producto escala 35
2.2. Bases 36
2.3. Notación de Dirac y representación matricial 38
2.4. Operadores 39
2.5. Autovalores y autovectores 41
2.6. Operador autoadjunto 42
2.7. Base propia común y conjunto completo 43
2.8. Espectro discreto y espectro continuo 44
2.9. Función de onda 45
2.10. Funciones de operadores 46
2.11. Operador proyección 47
2.12. Operador unitario 48
2.13. Operador densidad 49
2.14. Producto tensorial 49

3. Postulados de la mecánica cuántica **53**

3.1. Postulado sobre representación de un sistema 53
3.2. Postulado sobre medidas en un sistema 55
3.3. Postulado sobre observables posición y momento 63
3.4. Postulado sobre evolución temporal de un sistema 68
3.5. Postulado sobre representación de un sistema compuesto 84
3.6. Postulado sobre representación de un sistema con información incompleta 88

4. Momento angular en mecánica cuántica **99**

4.1. Momento angular en mecánica cuántica 99
4.2. Operador rotación y generadores de rotaciones 104
4.3. Momento angular orbital 106

4.4. Hamiltoniano de rotación 111
4.5. Momento angular de espín 112
4.6. Suma de momentos angulares 115
4.7. Momento angular en campos magnéticos 121
4.8. Formalismos análogos al de espín 124

5. Partículas indistinguibles en mecánica cuántica 131

5.1. Postulado de simetrización 131
5.2. Teorema espín-estadística 133
5.3. Fuerza de intercambio 137
5.4. Formalismos de ocupación y segunda cuantización 141
5.5. Oscilador armónico y formalismo de segunda cuantización 143

6. Teoría de perturbaciones estacionarias 151

6.1. Desarrollo perturbativo 151
6.2. Caso no degenerado 153
6.3. Caso degenerado 158

7. Método variacional 165

7.1. Principio variacional 165
7.2. Método variacional 167
7.3. Método de Ritz 169

8. Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo 173

8.1. Hamiltonianos dependientes del tiempo 173
8.2. Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo 177
8.3. Probabilidad de transición 178
8.4. Regla de oro de Fermi 184
8.5. Ley de decaimiento exponencial 186
8.6. Transiciones electromagnéticas 190

9. Partículas elementales e interacciones fundamentales 197

9.1. Partículas elementales 197
9.2. Simetría de fase local y origen de interacciones 199
9.3. Interacción electromagnética 202
9.4. Interacción débil 202
9.5. Interacción fuerte 207
9.6. Cálculo perturbativo y diagramas de Feynman 210
9.7. Campo de Higgs y origen de la masa 213
9.8. Apantallamiento de cargas y unificación de fuerzas 215
9.9. Reacciones de partículas 217
9.10. Leyes de conservación 218

10. Hadrones 225

10.1. Estructura de los hadrones y modelo de quarks 225
10.2. Multipletes de sabor 227
10.3. Espectro de los hadrones 229
10.4. Vector de estado de los hadrones 232
10.5. Clasificación y nomenclatura de los hadrones 238

11. Interacción nuclear fuerte y deuterón 241

11.1. Interacción nuclear fuerte 241
11.2. Deuterón 246

12. Propiedades globales de los núcleos 251

12.1. Composición y clasificación de los núcleos 251
12.2. Masa y energía de ligadura 253
12.3. Tamaño y forma de los núcleos 256
12.4. Espectro 260
12.5. Espín y paridad 261
12.6. Momentos electromagnéticos 261
12.7. Isoespín 263

13. Modelos de estructura nuclear 265

13.1. Modelo de gota líquida 265
13.2. Modelo de gas de Fermi 266
13.3. Modelo de capas 268
13.4. Modelo colectivo 275

14. Desintegraciones nucleares 283

14.1. Radiactividad 283
14.2. Desintegración alfa 287
14.3. Desintegración beta 292
14.4. Desintegración gamma 298

15. Átomo de hidrógeno 303

15.1. Hamiltoniano de Bohr 303
15.2. Estructura fina 311
15.3. Efecto Lamb 314
15.4. Estructura hiperfina 314
15.5. Resumen de correcciones de las energías 316
15.6. Transiciones electromagnéticas 317
15.7. Efectos Zeeman y Paschen-Back 322
15.8. Efecto Stark 323

16. Átomo de helio 327

16.1. Hamiltoniano para electrones independientes 327
16.2. Hamiltoniano con interacción entre electrones 329

16.3. Espectro 336
16.4. Transiciones electromagnéticas 338

17. Átomos polielectrónicos 339

17.1. Hamiltoniano 339
17.2. Teoría de Hartree 340
17.3. Construcción de la tabla periódica 346
17.4. Propiedades periódicas 348
17.5. Interacción residual y momentos angulares 350
17.6. Espectro 351
17.7. Transiciones electromagnéticas 355
17.8. Comparativa entre estructura atómica y nuclear 356

18. Enlaces atómicos y molécula de hidrógeno 359

18.1. Enlace iónico 359
18.2. Enlace covalente 360
18.3. Molécula de hidrógeno ionizada 364
18.4. Molécula de hidrógeno 369
18.5. Teoría del enlace de valencia general 376
18.6. Teoría de orbitales moleculares general 378
18.7. Valencia 387
18.8. Reacciones químicas 390
18.9. Fuerzas intermoleculares y redes 392

19. Espectros moleculares 397

19.1. Hamiltoniano molecular 397
19.2. Espectros moleculares 401
19.3. Autofunciones de onda moleculares 409
19.4. Transiciones electromagnéticas 411
19.5. Desexcitación electrónica 423

20. Apéndice: relaciones electromagnéticas 425

20.1. Desarrollo multipolar y momentos electromagnéticos 425
20.2. Momento dipolar magnético y momento angular 428
20.3. Campo magnético e interacción espín-órbita 431

Bibliografía 433

Prólogo

Este texto pretende ofrecer una visión general y unificada de la mecánica cuántica y de su aplicación a la descripción de las estructuras microscópicas de la materia en cuatro niveles: partículas, núcleos, átomos y moléculas. Su principal objetivo es servir de guía o manual básico para asignaturas sobre física cuántica y sobre fundamentos de física de partículas, nuclear, atómica y molecular que se imparten en los últimos cursos de grados universitarios de ciencias como Física o Química.

Los contenidos y la organización de este libro tienen como punto de partida los programas de las asignaturas Física Cuántica II y Estructura de la Materia del tercer curso del Grado en Física y del Doble Grado en Física y Matemáticas de la Universidad Complutense de Madrid. Algunos de los conceptos tratados en estas materias pueden resultar difíciles de relacionar entre sí, especialmente si se cursan con profesorado de diferentes departamentos o que provengan de distintas áreas de especialización. Aquí se busca introducirlas de una manera coherente y estableciendo continuas referencias entre temas que permitan conectar los conceptos más abstractos, relativos al formalismo de la mecánica cuántica, con las aplicaciones concretas a las estructuras de la materia. Además, se establecen vínculos con contenidos más avanzados que sirven como amplia introducción a asignaturas más especializadas, como Física Nuclear o Física Atómica y Molecular, que suelen impartirse en cuarto curso de grado. Se quiere con todo ello facilitar al estudiante la comprensión de nuevos conceptos mediante su articulación en esquemas previamente adquiridos y a través de comparaciones y relaciones entre diversos ámbitos, por ejemplo entre las estructuras de partículas compuestas, núcleos, átomos y moléculas, tratadas todas ellas con uniformidad de estilo y profundidad. Los conocimientos previos recomendados para seguir este texto son, con carácter general, los de los dos primeros cursos del Grado en Física, es decir, una introducción al cálculo y, especialmente, al álgebra, por el lado matemático, y por el lado físico unos fundamentos de mecánica y electromagnetismo clásicos y cierta familiaridad con la fenomenología y algunos

aspectos formales básicos de la física cuántica.

Si bien la asignatura de Física Cuántica II de la Universidad Complutense es análoga a la de otras universidades españolas, con el mismo nombre o como parte de una de mayor carga lectiva denominada Mecánica Cuántica, la asignatura de Estructura de la Materia es relativamente específica del Grado en Física en esta universidad y se introdujo como novedad en los planes de estudio hace algunos años. En otras universidades su contenido suele estar repartido en varias asignaturas más especializadas, como Física Nuclear y de Partículas o Física Atómica y Molecular, lo que dificulta que los estudiantes puedan identificar semejanzas y diferencias entre distintas estructuras de la materia.

El texto comienza con una introducción (cap. 1) en la que se describen algunos de los conceptos y relaciones más fundamentales de la física, se expone brevemente el desarrollo histórico de la disciplina y se explican las principales magnitudes y unidades usadas en este ámbito. A continuación, el contenido principal se organiza en seis partes:

I. Principios de la mecánica cuántica: formalismo matemático (cap. 2), postulados (cap. 3), momento angular (cap. 4) y partículas indistinguibles (cap. 5).

II. Métodos aproximados de cálculo de energías en mecánica cuántica: teoría de perturbaciones estacionarias (cap. 6), método variacional (cap. 7) y teoría de perturbaciones dependientes del tiempo (cap. 8).

III. Partículas: partículas elementales e interacciones fundamentales (cap. 9) y hadrones (cap. 10).

IV. Núcleos: interacción nuclear fuerte y deuterón (cap. 11), propiedades globales de los núcleos (cap. 12), modelos de estructura nuclear (cap. 13) y desintegraciones nucleares (cap. 14).

V. Átomos: átomo de hidrógeno (cap. 15), átomo de helio (cap. 16) y átomos polielectrónicos (cap. 17).

VI. Moléculas: enlaces atómicos y molécula de hidrógeno (cap. 18) y espectros moleculares (cap. 19).

En el apéndice se describen algunas magnitudes y relaciones electromagnéticas que aparecen en varios de los capítulos anteriores. Finalmente, se incluye una lista de referencias bibliográficas sobre los temas tratados.

En este texto, especialmente en las partes sobre el formalismo de la mecánica cuántica, se intercalan demostraciones y ejemplos con un desarrollo detallado que permite su seguimiento de manera autónoma, y que sirven para familiarizarse con los procedimientos formales de cálculo. Se ha procurado emplear en todo momento una notación homogénea y lo más explícita posible, con el fin de facilitar la identificación de los mismos objetos matemáticos o magnitudes físicas aunque aparezcan en contextos diferentes. Para representar el estado cuántico de los sistemas se emplea tanto la notación de bras y kets de Dirac como la de funciones de onda, la primera

especialmente al introducir el formalismo de la mecánica cuántica y en su aplicación a partículas y núcleos, y la segunda principalmente en su aplicación a átomos y moléculas.

Agradecimientos

La visión pedagógica del área de conocimiento de Física Atómica, Molecular y Nuclear en el Grado en Física de la Universidad Complutense de Madrid proviene de una larga tradición docente a la que han contribuido numerosos profesores del actual Departamento de Estructura de la Materia, Física Térmica y Electrónica, y antes en el de Física Atómica, Molecular y Nuclear. A todos ellos agradezco sus aportaciones a lo largo de los años, y de manera muy particular a aquellos que me introdujeron en la docencia e investigación en el área y que me han ayudado de manera más directa a profundizar en ella: Elvira Moya de Guerra Valgañón, José Manuel Udías Moinelo, Joaquín Retamosa Granado, Luis Mario Fraile Prieto y Juan Manuel Rodríguez Parrondo, así como a los investigadores del Instituto de Estructura de la Materia del CSIC Pedro Sarriguren Suquilbide y Eduardo Garrido Bellido.

A todos los alumnos que en los últimos años han estudiado atentamente los diversos materiales docentes que han dado lugar a este texto les agradezco su motivación e interés por la materia (nunca mejor dicho), las preguntas que me han formulado (algunas más prácticas y otras de carácter más interpretativo, a veces casi filosófico), sus sugerencias y su apoyo.

1. Introducción

1.1. Cuantos de energía y dualidad onda-partícula

Todo cuerpo con temperatura por encima del cero absoluto emite radiación electromagnética, que bajo las condiciones ideales de perfecta opacidad y nula reflectancia, asociadas a un emisor perfecto, recibe el nombre de *radiación de cuerpo negro*. Las teorías clásicas del electromagnetismo y de la termodinámica predicen que esa radiación transporta la misma cantidad de energía en cada uno de sus *modos*, es decir, para cada uno de los posibles valores que puede tomar su longitud de onda λ o su frecuencia f (relacionadas como $f = c/\lambda$, con c la velocidad constante de la radiación en el vacío). El número de modos distintos en que emite un cuerpo negro crece conforme disminuye la longitud de onda, de manera que, al incluir en el cálculo clásico la contribución de longitudes cada vez más cortas, la energía total emitida resulta infinita. Para resolver esta inconsistencia, conocida como *catástrofe ultravioleta*, Max Planck propuso en 1900 que la energía asociada a una onda electromagnética solo puede tomar ciertos valores discretos, múltiplos enteros de unas unidades o paquetes fundamentales (*cuantos*), cuya energía individual es inversamente proporcional a la longitud de onda. Según esta hipótesis, si la energía del cuanto asociado a una cierta longitud de onda es grande en comparación con la que le correspondería en la teoría clásica, su contribución a la radiación emitida se reduce con un factor exponencial. Así, para longitudes de onda cada vez más cortas, asociadas a cuantos cada vez más energéticos, su contribución a la energía emitida disminuye exponencialmente, y la energía total es finita. La distribución de energía resultante (*ley de Planck*) reproduce los datos experimentales en todo el rango de longitudes de onda.

Por otro lado, a principios del siglo XX también comenzaron a surgir evidencias de que los sistemas, a muy pequeña escala y dependiendo del experimento que se realice o de las magnitudes que se midan, pueden comportarse como partículas o como ondas, que son dos entidades fácilmente distinguibles en física clásica. Por

ejemplo, la luz se comporta como una onda en los fenómenos de interferencia, como el experimento de la *doble rendija*, y se comporta como partículas en otras situaciones, como en el *efecto fotoeléctrico*.

El experimento de la doble rendija, descrito por primera vez por Thomas Young en 1801, consiste en dirigir un haz de luz sobre un obstáculo opaco que tiene dos finas aperturas próximas entre sí, cada una de las cuales actúa como origen de ondas independiente. Las ondas que surgen de las dos rendijas interfieren entre sí, sumando sus amplitudes en algunos puntos del espacio (interferencia constructiva) y restándolas en otros (interferencia destructiva). Si se coloca a continuación una pantalla, aparece en ella una imagen cuya intensidad varía alternativamente entre franjas brillantes y oscuras, que constituye un patrón de interferencia típico cuyo detalle depende de la forma de las rendijas y de la separación entre ellas.

Por otro lado, en el efecto fotoeléctrico, estudiado por primera vez en 1887 por Heinrich Hertz, se observa que un haz de luz, o de radiación electromagnética en general, que incide sobre una pieza de metal es capaz de arrancar electrones de ella. Para cada metal existe una frecuencia mínima de la radiación (*frecuencia umbral*) por debajo de la cual ningún electrón es arrancado, pero si la frecuencia supera ese umbral, los electrones saltan instantáneamente de la pieza, en número directamente proporcional a la intensidad de la radiación y con energía cinética directamente proporcional a la frecuencia. Según la teoría clásica del electromagnetismo, la incidencia continua de radiación sobre el metal, incluso de muy baja intensidad, podría acumular energía suficiente para arrancar electrones, y ello de manera independiente de su frecuencia, en clara contradicción con lo observado. Para resolverlo, Albert Einstein propuso en 1905 que la radiación electromagnética está constituida por unidades discretas, cada una de ellas con una energía directamente proporcional a la frecuencia. Estas unidades se pueden identificar con los cuantos introducidos por Planck, que posteriormente recibieron el nombre de *fotones*. Según esta interpretación, cuando la radiación incide sobre un metal, cada uno de los fotones colisiona con un único electrón y lo arranca únicamente si transporta la energía suficiente, es decir, si la frecuencia es mayor que la umbral. Cuanto más se supere la frecuencia umbral, mayor será la energía cinética cedida a los electrones arrancados. En cambio, el número de estos será proporcional al número de fotones incidentes, es decir, a la intensidad de la radiación, pero independiente de su frecuencia.

Las dos descripciones alternativas de la naturaleza de la luz, en términos de partículas (corpúsculos) o de ondas, habían estado presentes en la física desde el siglo XVII, con Isaac Newton como principal defensor de la primera hipótesis y Christiaan Huygens de la segunda. Los resultados experimentales e interpretaciones teóricas de la doble rendija y del efecto fotoeléctrico condujeron en el siglo XX a una visión integrada de ambas corrientes: la *dualidad onda-partícula*. Este doble carácter se extendió posteriormente desde la luz a la materia, cuyos componentes, por ejemplo los electrones, habían sido considerados tradicionalmente como paradigma de partículas. En 1927 Clinton Davisson y Lester Germer llevaron a cabo un experimento en el que se dirigía un haz de electrones sobre una lámina de níquel, que resultaban dispersados por esta, y a continuación se detectaban a diferentes ángulos respecto a la dirección de incidencia. Observaron que el número de electrones detectados variaba

con el ángulo, tomando valores mínimos y máximos alternativamente. A partir de ello interpretaron que los electrones se comportan como ondas, que son dispersadas por los obstáculos que encuentran en la lámina, es decir, por los cationes de níquel dispuestos regularmente en la red metálica. Al interactuar con los electrones, cada catión actúa como origen de ondas, de manera que las que proceden de diferentes posiciones de la red interfieren entre sí generando el patrón observado. Los cationes de la red metálica actúan de manera análoga a las aperturas del experimento de la doble rendija; de hecho, este último se ha llevado a cabo, además de con haces de luz, con haces de electrones y de otros cuerpos de tamaños y masas cada vez mayores, como núcleos, átomos e incluso macromoléculas, y en todos los casos aparecen patrones de interferencia propios del comportamiento ondulatorio.

El principio de dualidad onda-partícula está abierto a interpretaciones que otorgan diferente grado de realidad a cada uno de los dos aspectos, o que consideran uno de ellos como fundamental y el otro como una propiedad derivada o emergente. Por ejemplo, la onda puede considerarse como una mera herramienta de cálculo o bien como una entidad real, tanto como pueda serlo la partícula asociada. En la mecánica cuántica ondulatoria de Erwin Schrödinger, publicada en 1926, adquieren un papel protagonista las funciones de onda, que describen el estado de los sistemas cuánticos asignando un número complejo adimensional a cada punto del espacio de configuraciones, constituido por coordenadas generalizadas y cuya dimensión depende del número de componentes del sistema. A pesar del nombre, el comportamiento ondulatorio de la función de onda solo se evidencia en algunas representaciones; en cualquier caso, su introducción en la física tuvo como antecedente directo el concepto de *onda de materia* propuesto por Louis De Broglie en 1924, que relaciona el momento de una partícula (producto de su masa y su velocidad) con la longitud de la onda de su descripción complementaria (ec. 1.1). Sin embargo, las ondas de materia de De Broglie y las funciones de onda de Schrödinger son conceptualmente muy diferentes. Las primeras son en cierto modo análogas a las ondas que aparecen en muchas áreas de la física clásica y que describen la variación periódica en el espacio y en el tiempo del valor real (no complejo) de una magnitud física con dimensiones, que en este caso sería una hipotética densidad de materia o algo similar. Las segundas, en cambio, toman valores complejos adimensionales que dependen de una variable perteneciente a un espacio de configuraciones multidimensional.

1.2. Desarrollo histórico de los marcos teóricos de la mecánica

El desarrollo histórico de la mecánica clásica y el de la mecánica cuántica han sido en muchos aspectos paralelos, aunque con un desfase temporal entre ambos. El origen de la mecánica clásica se encuentra en las evidencias observacionales y experimentales acerca del movimiento de los cuerpos celestes y terrestres, como las descritas en las obras *Astronomia Nova* de Johannes Kepler (1609) o en *Discorsi e dimostrazioni matematiche intorno a due nuove scienze attenenti alla meccanica e i movimenti locali* de Galileo Galilei (1638). El inicio análogo en la mecánica cuántica, casi tres siglos más tarde, se encuentra en el análisis de fenómenos como la radiación del cuerpo negro y el efecto fotoeléctrico, descritos en el apartado anterior, y que dieron

lugar a las hipótesis de Planck de 1900 y de Einstein de 1905, respectivamente.

La mecánica racional fue una primera formulación coherente de los principios de la mecánica clásica, cuyos máximos exponentes son las leyes de Newton, publicadas en su *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica* (1687), o los desarrollos de Leonhard Euler, publicados en su *Mechanica sive motus scientia analytice exposita* (1736) y en obras posteriores, en particular sobre la mecánica del sólido rígido (1765). El análogo en la mecánica cuántica de estas primeras formulaciones sería la conocida como vieja teoría cuántica, que tiene como hito representativo la cuantización de las órbitas del electrón en el átomo de hidrógeno propuesta por Niels Bohr en 1913 y perfeccionada por Arnold Sommerfeld y William Wilson en 1916.

Desde finales del siglo XVIII se desarrollaron formulaciones sistemáticas de la mecánica clásica, comenzando por la que Joseph-Louis Lagrange expuso en su *Mécanique Analytique* (1788), que ya había sido propuesta en parte previamente por Euler y que hoy se conoce como mecánica lagrangiana. Un formalismo sistemático análogo en mecánica cuántica es el de integración sobre caminos de Richard Feynman, aunque no fue uno de los primeros (1948). La formulación clásica de William Hamilton (a partir de 1834), que ya había sido planteada parcialmente por Lagrange y que hoy se conoce como mecánica hamiltoniana, encuentra su formulación cuántica análoga en la mecánica ondulatoria de Erwin Schrödinger (1926) y en generalizaciones relativistas como la de Paul Dirac (1929). La ecuación de Hamilton-Jacobi junto con la hipótesis de las ondas de materia de De Broglie (1924), además de inspirar la ecuación de ondas de Schrödinger, fueron el origen de los formalismos de onda piloto como el de David Bohm (1952), asociados a una interpretación realista (no ortodoxa) de la mecánica cuántica basada en variables ocultas. Por último, la formulación clásica de corchetes de Siméon Poisson propuesta a partir de 1811 en su *Traité de mécanique* es equiparable en el ámbito cuántico a la mecánica matricial de Werner Heisenberg (1925). Paul Dirac unificó la mecánica ondulatoria de Schrödinger y la mecánica matricial de Heisenberg como dos representaciones distintas de una misma teoría, que formuló en el marco de espacios de Hilbert (*The Principles of Quantum Mechanics*, 1930). Este formalismo fue posteriormente completado por John von Neumann (*Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, 1932)[1].

Independientemente de la formulación empleada, y a pesar de los paralelismos existentes entre ellas, la mecánica clásica y la mecánica cuántica presentan algunas diferencias formales con profundas consecuencias. En mecánica clásica el estado de un sistema viene determinado por su posición y por su momento, cuyas componentes en un espacio tridimensional corresponden a un punto del espacio de fases. Cualquier magnitud mecánica observable del sistema es una función de esas dos variables dinámicas que hace corresponder cada punto del espacio de fases con un número real que representa el valor de la magnitud. En mecánica cuántica, en cambio, el estado de un sistema se representa mediante un vector de estado o función de onda, que es

[1] El formalismo de la mecánica cuántica de Dirac y von Neumann, basado en un conjunto de axiomas matemáticos y de postulados físicos, es el que se seguirá esencialmente en este libro, empleando las representaciones matricial y de funciones de onda y la notación de bras y kets introducida por Dirac en 1939.

un elemento de una estructura algebraica de tipo espacio vectorial denominada espacio de Hilbert (apdo. 3.1), y las magnitudes observables se representan mediante un cierto tipo de operadores, que son objetos matemáticos que actúan sobre los vectores de estado. Los posibles resultados de las medidas de esos observables corresponden a unos números reales asociados al operador, denominados autovalores (apdo. 3.2), que pueden pertenecer a un intervalo continuo o bien a un conjunto discreto. Este último caso representa una importante diferencia con la mecánica clásica, ya que implica que algunas magnitudes cuánticas solo pueden tomar ciertos valores discretos, o cuantizados, como ocurre por ejemplo con el momento angular siempre, o con la energía o el momento lineal en algunos casos.

Otra diferencia fundamental entre la mecánica clásica y la cuántica es que la primera es determinista, ya que, para una posición y momento dados, la función que representa el observable proporciona con certeza el resultado de la medida. En mecánica cuántica, en cambio, para cada autovalor del operador que representa el observable únicamente se puede calcular la probabilidad de que sea obtenido en una medida[2]. Además, tras realizar una medida sobre un sistema cuántico el vector o función de onda que representa su estado cambia instantáneamente (apdo. 3.2). Este es el motivo por el que el orden en que se efectúan las medidas de distintos observables sobre un mismo sistema puede influir en los resultados obtenidos, dependiendo de las relaciones de conmutación que cumplan los operadores correspondientes. De esas relaciones de conmutación se derivan relaciones de incertidumbre entre observables, que en algunos casos fijan límites a la precisión con que se pueden determinar los valores que toman en un sistema (ecs. 1.2, 1.4, apdo. 3.2.2).

La evolución temporal de un sistema en mecánica clásica se obtiene a través de ecuaciones diferenciales para las variables posición y momento dependientes del tiempo, por ejemplo las ecuaciones de Hamilton. En mecánica cuántica no relativista se remplazan por la ecuación de Schrödinger, cuya variable es el propio vector o función de onda que representa el estado del sistema, o bien, en una descripción alternativa, se emplea la ecuación de Heisenberg, que determina la evolución temporal de un operador que representa un observable sobre el sistema (apdo. 3.4).

Por último, un sistema compuesto por varios sistemas individuales se describe en mecánica clásica mediante un punto del espacio de fases que resulta del producto cartesiano de los espacios de fases de los sistemas constituyentes. El análogo en mecánica cuántica es un producto tensorial entre los vectores de estado de cada uno de los sistemas constituyentes, que pertenece al espacio de Hilbert producto tensorial de los espacios individuales. Pero también es posible que el estado del sistema compuesto venga descrito por una combinación lineal de esos productos tensoriales entre

[2] Esas probabilidades se calculan de manera determinista, y en ese sentido la mecánica cuántica también lo es, pero no en lo que se refiere a los resultados efectivamente obtenidos en una medida. El carácter probabilístico o aleatorio de la mecánica cuántica está relacionado con la distribución de probabilidades de los posibles resultados de las medidas, y no con los fenómenos caóticos que pueden darse en mecánica clásica, que son consecuencia de una evolución temporal no lineal que introduce una alta sensibilidad a las condiciones iniciales (la evolución temporal en mecánica cuántica es lineal, apdo. 3.4.).

vectores individuales, lo que amplía enormemente el número de estados posibles y abre la puerta al fenómeno del entrelazamiento cuántico (apdo. 3.5). En un estado cuántico entrelazado se puede conocer toda la información posible sobre el estado compuesto sin que ello implique conocer completamente el estado de los sistemas constituyentes, algo que no tiene sentido en mecánica clásica. Otra consecuencia del entrelazamiento cuántico es que ciertas medidas sobre sistemas distintos pueden presentar correlaciones perfectas, aunque se encuentren muy alejados entre sí, lo que permite someter a comprobación experimental algunos cimientos del mundo físico, como el *realismo*, que implica que las propiedades de los sistemas existen y están bien definidas antes de ser medidas, o la *localidad*, que impone un límite a la velocidad con que pueden transmitirse las señales.

La comparación realizada hasta aquí sobre la evolución histórica y los principios de la mecánica clásica y la cuántica se ha referido esencialmente al comportamiento de cuerpos individuales, denominados genéricamente *partículas*, en un régimen no relativista, es decir, con velocidades muy inferiores a la de la luz en el vacío. Para construir una mecánica relativista deben introducirse las relaciones entre espacio y tiempo y entre momento y energía que surgen de los postulados de la teoría de la relatividad especial de Einstein (apdo. 1.4). También es posible formular teorías mecánicas cuyas entidades fundamentales no estén localizadas en el espacio y por tanto no se describan mediante magnitudes totales, como en el caso de las partículas, sino que se refieran a *campos*, que se extienden en el espacio-tiempo y se describen mediante densidades de magnitudes en cada punto. Las partículas se pueden identificar entonces con excitaciones de esos campos, y en un contexto relativista puede describirse su creación y destrucción, razón por la cual las teorías cuánticas de campos relativistas son necesarias para la física de partículas y algunos aspectos de la física nuclear y atómica. La tabla 1.1 recoge las denominaciones de los diversos marcos teóricos de la mecánica según incluyan o no los principios cuánticos y relativistas o contengan como entidades fundamentales las partículas o los campos.

Tabla 1.1. Denominación de diversos marcos teóricos de la mecánica según los principios que contienen (clásicos o cuánticos, relativistas o no relativistas, sobre partículas o sobre campos)

	No relativista		**Relativista**	
	Partículas	**Campos**	**Partículas**	**Campos**
Clásico	Mecánica newtoniana	Teoría de campos newtoniana	Mecánica relativista	Teoría de campos relativista
Cuántico	Mecánica cuántica no relativista	(Teoría cuántica de campos no relativista)	Mecánica cuántica relativista	Teoría cuántica de campos (relativista)

1.3. Relación entre espacio y momento y entre tiempo y energía

Existen en física, a nivel fundamental, algunas relaciones generales entre el espacio y el momento lineal. En primer lugar, en el contexto de la dualidad onda-partícula, el espacio necesario para que una onda complete un ciclo, que es la *longitud de onda* λ, o su inversa el *número de onda* $\tilde{\nu} = 1/\lambda$ (o el *número de onda angular* $k = 2\pi\tilde{\nu}$), se relacionan con el momento lineal p de la partícula correspondiente a través de la *ecuación de De Broglie*:

$$p = \frac{h}{\lambda} = h\tilde{\nu} = \hbar k \tag{1.1}$$

donde h es la constante de Planck y $\hbar$ es la constante de Planck reducida, $\hbar = h/2\pi$ (apdo. 1.8).

La incertidumbre de una magnitud física está relacionada con el intervalo en el que podría encontrarse su valor en un cierto sistema. Continuando en el contexto de la dualidad onda-partícula, la segunda relación entre espacio y momento en física fundamental establece que el producto de la incertidumbre en la posición de un sistema Δx y de la incertidumbre en su momento lineal Δp cumple la siguiente desigualdad:

$$\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{1.2}$$

es decir, una menor incertidumbre (mayor precisión) en una de las magnitudes implica una mayor incertidumbre en la otra. Esta relación es un caso particular del conocido como *principio de incertidumbre* (apdo. 3.2.2).

Por último, según el teorema enunciado por Emmy Noether en 1915, existe una relación entre simetrías y cantidades conservadas que puede aplicarse al espacio y al momento: el hecho de que las leyes de la física sean las mismas en cualquier punto del espacio, es decir, que las ecuaciones sean invariantes (simétricas) bajo traslaciones espaciales, implica que el momento lineal es una cantidad conservada.

De manera análoga a lo anterior, existen también a nivel fundamental relaciones generales entre el tiempo y la energía. En el contexto de la dualidad onda-partícula, el tiempo necesario para que una onda complete un ciclo, que es el *periodo de la onda* $\mathcal{T}$, o su inversa la *frecuencia de la onda* $f = 1/\mathcal{T}$ (o la *frecuencia angular* $\omega = 2\pi f$), se relacionan con la energía E de la partícula correspondiente a través de la *ecuación de Planck-Einstein*:

$$E = \frac{h}{\mathcal{T}} = hf = \hbar\omega \tag{1.3}$$

donde h y $\hbar$ son, de nuevo, la constante de Planck y la constante de Planck reducida.

El producto de la incertidumbre en un intervalo de tiempo característico de un sistema Δt, que habitualmente está relacionado con el tiempo que permanece sin sufrir un cambio significativo en su estado, y de la incertidumbre en su energía ΔE cumple la siguiente desigualdad:

$$\Delta t \, \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \tag{1.4}$$

que es otro caso particular del principio de incertidumbre.

Por último, según el teorema de Noether, el hecho de que las leyes de la física sean las mismas en cualquier instante de tiempo, es decir, que las ecuaciones sean invariantes (simétricas) bajo traslaciones temporales, implica que la energía es una cantidad conservada.

1.4. Relación entre espacio y tiempo: relatividad especial

La teoría de la relatividad especial propuesta por Albert Einstein en 1905 se sustenta en dos postulados. Por un lado, todos los *sistemas inerciales*, es decir, con velocidad relativa constante, son equivalentes con respecto a todas las leyes de la física. Por otro lado, existe una velocidad máxima fundamental c (la que llevan en el vacío las radiaciones asociadas a partículas sin masa, como la luz) que es invariante, es decir, que es la misma en cualquier sistema de referencia inercial. De ambos postulados se deducen ciertas transformaciones que combinan el espacio y el tiempo a través de la velocidad de la luz en el vacío. Estas transformaciones y el resto de relaciones en relatividad especial pueden expresarse de manera más compacta en función de los siguientes parámetros dependientes de la velocidad v de un sistema:

$$\beta = \frac{v}{c} \tag{1.5}$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \tag{1.6}$$

El valor de β varía entre 0 y 1, mientras que el valor más bajo de γ es 1, para $\beta = 0$, y tiende a infinito cuando β tiende a 1.

También resulta conveniente en relatividad especial emplear magnitudes en forma de *cuadrivectores*, de cuyas cuatro componentes (identificadas habitualmente con un superíndice $\mu = \{0, 1, 2, 3\}$) una está relacionada con la coordenada temporal (por ejemplo, la primera, $\mu = 0$) y las otras tres están relacionadas con las coordenadas espaciales. El cuadrivector posición se define como $x^\mu = (ct, \vec{x}) = (ct, x, y, z)$. El cuadrivector velocidad (*cuadrivelocidad*) se define como la derivada del cuadrivector posición respecto al tiempo propio del sistema, τ, que se relaciona con el tiempo en cualquier otro sistema de referencia como $\tau = t/\gamma$, resultando: $u^\mu = dx^\mu/d\tau = \gamma\, dx^\mu/dt = (\gamma c, \gamma\vec{v}) = (\gamma c, \gamma v_x, \gamma v_y, \gamma v_z)$. El cuadrivector momento (*cuadrimomento*) se define como el producto de la cuadrivelocidad por la masa: $p^\mu = mu^\mu = (\gamma mc, \gamma m\vec{v})$; la primera componente multiplicada por c se identifica con la energía total de un sistema aislado (sin interacciones), y las otras tres con el vector momento:

$$E = \gamma mc^2 \tag{1.7}$$

$$\vec{p} = \gamma m\vec{v} \tag{1.8}$$

de manera que el cuadrimomento puede escribirse como:

$$p^\mu = (\gamma mc, \gamma m\vec{v}) \equiv (E/c, \vec{p}) \tag{1.9}$$

De la energía total relativista de la ec. 1.7 y del módulo del momento relativista de la ec. 1.8, dado por $p \equiv |\vec{p}| = \gamma m|\vec{v}| = \gamma m\beta c$, se deduce la siguiente relación entre ambos:

$$E = \frac{pc}{\beta} \tag{1.10}$$

El módulo al cuadrado de un cuadrivector se obtiene como el producto escalar cuadridimensional consigo mismo: $(a^\mu)^2 = (a^0)^2 - \vec{a}\cdot\vec{a} = (a^0)^2 - (a^1)^2 - (a^2)^2 - (a^3)^2$ (o con signo opuesto, dependiendo del convenio empleado). Con esta definición, el módulo al cuadrado de un cuadrivector resulta una cantidad invariante, es decir, que no depende del sistema de referencia inercial en el que se mida. Así, el cuadrado del cuadrivector posición proporciona el intervalo (distancia espacio-temporal) invariante de un evento al origen de coordenadas, y el cuadrado de la diferencia entre los cuadrivectores posición de dos eventos es el intervalo invariante entre ambos. El cuadrado de la cuadrivelocidad, $(u^\mu)^2 = c^2$, reproduce el postulado de la invariancia de la velocidad de la luz. Y el cuadrado del cuadrimomento, $(p^\mu)^2 = (mu^\mu)^2 = (mc)^2$, es proporcional al cuadrado de la *masa invariante* del sistema[3]. De esta última relación y de la ec. 1.9, de donde $(p^\mu)^2 = (E/c)^2 - p^2$, se deduce:

$$E^2 = (pc)^2 + (mc^2)^2 \tag{1.11}$$

Para un sistema aislado (sin interacciones) y en reposo ($p = 0$) la energía que proporciona esta expresión es:

$$E_0 = mc^2 \tag{1.12}$$

es decir, en estas condiciones existe una equivalencia entre la masa y la energía, ya que ambas magnitudes se distinguen únicamente en el factor constante e invariante c^2. La energía E_0 es entonces la energía en reposo o la energía equivalente a la masa de un sistema aislado.

La energía cinética T de un sistema aislado se define como la diferencia entre su energía total y la energía equivalente a su masa:

$$T = E - mc^2 = mc^2\,(\gamma - 1) \tag{1.13}$$

1.5. Energía

La energía es una de las magnitudes más importantes en la descripción de las estructuras microscópicas de la materia. En los apartados anteriores se ha visto su relación fundamental con el tiempo, en términos de la dualidad onda-partícula (relación de Planck-Einstein, principio de incertidumbre) y en términos de simetría (teorema de

[3] La masa invariante es la masa de un sistema aislado y en reposo. En un sistema compuesto la suma de las masas de sus constituyentes aislados y en reposo no coincide en general con la masa invariante del conjunto, porque esta última tiene en cuenta el movimiento de los constituyentes y sus interacciones mutuas dentro del sistema.

Noether), así como su relación con el momento, en el marco de la relatividad especial. Desde el punto de vista de la teoría cuántica, los posibles valores de la energía que se pueden obtener en una medida corresponden a los autovalores del operador hamiltoniano del sistema, que a su vez determinan su evolución temporal (apdo. 3.4).

En un marco no relativista se definen tres tipos fundamentales de energía:

- *Energía cinética*, asociada al movimiento del sistema, que depende de su momento lineal p y de su masa m:

$$T_{no\,rel.} = \frac{p^2}{2m} = \frac{mv^2}{2} \tag{1.14}$$

- *Energía potencial*, asociada a la posición del sistema en un campo o a su distancia respecto a otros sistemas que ejercen fuerzas sobre él.
- *Energía de masa*, asociada a la masa del sistema, que no suele aparecer explícitamente en tratamientos no relativistas, pero que facilita la comparación con el marco relativista:

$$E_{masa} = mc^2 \tag{1.15}$$

Por otro lado, en un marco relativista se definen dos tipos de energía:

- *Energía de movimiento* (ec. 1.11), que es una combinación de energía asociada al momento lineal p y de energía asociada a la masa m. Para velocidades mucho menores que la de la luz en el vacío, $v << c$, esta energía se aproxima a la suma de las energías no relativistas cinética (ec. 1.14) y de masa (ec. 1.15):

$$\begin{aligned} E = & \left[(mc^2)^2 + (pc)^2\right]^{1/2} = mc^2 \left[1 + \left(\frac{p}{mc}\right)^2\right]^{1/2} \approx mc^2 \left[1 + \frac{1}{2}\,\frac{p^2}{m^2c^2}\right] \\ & = mc^2 + \frac{p^2}{2m} = E_{masa} + T_{no\,rel.} \end{aligned} \tag{1.16}$$

  donde se ha llevado a cabo un desarrollo en serie de Taylor hasta primer orden en $(p/mc)^2$, que es pequeño cuando $v << c$. Si el sistema se encuentra en reposo ($p = 0$) esta energía toma el valor $E_0 = E_{masa} = mc^2$ (ecs. 1.12, 1.15).
  Para partículas sin masa, que se desplazan en el vacío a la velocidad de la luz, la teoría de la relatividad no permite obtener una energía de movimiento a partir de su velocidad, ya que la energía y el momento en las ecs. 1.7 y 1.8 resultan indeterminadas ($\gamma m \to \infty \cdot 0$). Sí se puede relacionar la energía con el momento mediante las ecs. 1.10 o 1.11, que resulta $E = pc$. La teoría cuántica determina esta energía a través de la relación de Planck-Einstein, que depende de la frecuencia f de la onda asociada a la partícula: $E = hf$ (ec. 1.3).
- *Energía de campo*, que es la integral en todo el espacio de la densidad de energía asociada a un campo. La densidad de energía depende del cuadrado de la intensidad del campo en cada punto. Cuando intervienen dos o más partículas que interactúan entre sí, en cada punto del espacio se suman las intensidades de los campos que crean todas ellas. Al calcular el cuadrado de la intensidad total para obtener la densidad de energía en ese punto resultan términos cruzados dependientes de las distancias entre las partículas, que corresponden a la energía potencial que se emplea habitualmente en contextos no relativistas.

La *energía de ligadura* de un sistema es la diferencia entre su energía en reposo y la energía de sus constituyentes también en reposo y en ausencia de interacciones entre ellos. En un sistema ligado las energías cinéticas y las energías potenciales de sus constituyentes están relacionadas mediante el *teorema del virial*. En particular, si la energía potencial entre dos constituyentes puede escribirse en función de la distancia que los separa, r_{ij}, como:

$$V_{ij} = \kappa\, r_{ij}^n \tag{1.17}$$

entonces el valor de la energía cinética total de los constituyentes promediada en el tiempo, $\langle T \rangle$, y el valor de la energía potencial total de los constituyentes promediada en el tiempo, $\langle V \rangle$, se relacionan como:

$$\langle T \rangle = \frac{n}{2} \langle V \rangle \tag{1.18}$$

Por ejemplo, para una estructura cuyos constituyentes se mantienen ligados por la interacción coulombiana, como el protón y el electrón en un átomo de hidrógeno, se tiene $V_{ij} = \kappa / r_{ij}$, de donde $n = -1$ y por tanto $\langle T \rangle = -\langle V \rangle / 2$.

El teorema del virial implica que los promedios temporales $\langle T \rangle$ y $\langle V \rangle$ son en general del mismo orden de magnitud. La energía de ligadura total de un sistema es la suma de las energías potenciales y cinéticas de sus constituyentes, y cuanto mayor sea su valor absoluto, mayores serán también típicamente las energías cinéticas de los constituyentes en comparación con las energías equivalentes a sus masas, lo que se traduce en que adquieren velocidades relativistas en el interior del sistema ligado (un valor alto de T/mc^2 corresponde a un valor alto de γ, ec. 1.13).

1.6. Las estructuras microscópicas de la materia

La idea de que la materia no es continua, sino que está constituida por unidades discretas, ya se contemplaba en algunas corrientes filosóficas griegas en torno al siglo V a. C., donde esas entidades tomaron el nombre de *átomos*, término que hace alusión a su supuesta naturaleza indivisible. Sin embargo, las primeras evidencias de su existencia y de su estructura interna, ya que finalmente resultaron ser divisibles, no aparecieron hasta el siglo XIX.

En 1869 Dmitri Mendeleyev, basándose en algunas propuestas anteriores, organizó los 56 elementos químicos conocidos entonces en grupos según sus propiedades químicas y en orden creciente de masa, en una disposición similar a la de la tabla periódica actual. La mera organización de un número tan grande de sustancias ya parece indicar que los átomos que las forman pueden estar constituidos por diferentes combinaciones de un número reducido de entidades subatómicas más fundamentales. Una de ellas, el *electrón*, fue identificada en 1897 por Joseph John Thomson en los rayos catódicos, aunque muchos fenómenos eléctricos, que involucran el desplazamiento y acumulación de estas partículas, se conocían desde la Antigüedad. Thomson propuso en 1904 un modelo de estructura atómica basado en una distribución uniforme de masa con carga positiva que contiene en su superficie un conjunto

de electrones (incrustados como pasas en un bizcocho, de donde procede el nombre de *modelo de pastel de pasas*), con una carga total negativa que iguala a la positiva del interior.

Un año antes, en 1896, Henri Becquerel había descubierto que algunas sustancias, como el uranio, emitían espontáneamente radiaciones originadas en los propios átomos como resultado de su desintegración y de la expulsión de algunos de los fragmentos producidos. Estudiando esas mismas radiaciones, Marie Sklodowska-Curie y Pierre Curie descubrieron en 1898 algunos elementos desconocidos hasta la fecha que también las emitían, es decir, que también eran *radiactivos*. Unos años más tarde Ernest Rutherford identificó tres tipos distintos de estas radiaciones, que denominó *alfa*, *beta* y *gamma*. A partir del año 1908 Rutherford y sus colaboradores Ernest Marsden y Hans Geiger llevaron a cabo una serie de experimentos en los que se dirigía un haz de partículas alfa sobre una lámina muy fina de oro, y a continuación se detectaban a diferentes ángulos respecto a la dirección de incidencia. La mayor parte de las partículas atravesaban la lámina y continuaban con una trayectoria ligeramente desviada respecto a la inicial, pero una pequeña proporción rebotaban y prácticamente daban media vuelta. Un análisis cuidadoso de los resultados llevó a Rutherford a concluir en 1911 que algunas partículas alfa chocaban con una estructura interna de los átomos de muy pequeño volumen en el que se concentra la mayor parte de su masa y una gran cantidad de carga eléctrica. Denominó *núcleo* a esta estructura y postuló que en torno a ella, y a una gran distancia en comparación con su tamaño, orbita un conjunto de electrones (como los planetas alrededor del Sol, de donde proviene el nombre de *modelo planetario*), cuya carga negativa total compensa la carga positiva del núcleo.

Los experimentos realizados en los años posteriores confirmaron que las radiaciones alfa, beta y gamma se originan en los núcleos atómicos, que deben poseer por tanto una cierta extensión y estructura interna. Rutherford descubrió que las partículas alfa podían reaccionar con núcleos del nitrógeno del aire y producir núcleos de hidrógeno, que son los más ligeros y tienen una unidad de carga positiva. En 1920 identificó el núcleo del átomo de hidrógeno como un constituyente elemental de todos los núcleos, que denominó *protón*. Esta idea coincidía con una hipótesis anterior de William Prout, basada en que las masas de los átomos de todos los elementos son, con muy buena aproximación, múltiplos enteros de la masa del átomo de hidrógeno. En 1932 James Chadwick identificó un nuevo constituyente de los núcleos atómicos, con una masa similar a la del protón (en ambos casos unas 1800 veces mayor que la del electrón), pero con carga neutra, que se denominó *neutrón*. Ese mismo año Werner Heisenberg propuso un modelo del núcleo atómico constituido por protones y neutrones que encajaba con las evidencias experimentales de masas y cargas nucleares.

Los principios de la física cuántica que surgieron a comienzos del siglo XX se incorporaron al modelo atómico elaborado por Niels Bohr en 1913. La teoría electromagnética clásica predice que las cargas aceleradas, como son los electrones en órbitas circulares en torno a un núcleo, emiten radiación electromagnética y por tanto pierden energía, lo que causaría su caída en espiral hacia el núcleo e implicaría la inestabilidad del átomo. Para evitarlo, el *modelo atómico de Bohr* contemplaba

únicamente órbitas del electrón en las que su momento angular toma valores múltiplos enteros de una cierta cantidad, es decir, están cuantizadas. Años después, De Broglie reinterpretó esta condición como la que cumplen las órbitas cuya longitud contiene un número entero de longitudes de la onda asociada al electrón, según su hipótesis de dualidad onda-partícula (ec. 1.1). En 1916 Arnold Sommerfeld amplió el modelo para incluir órbitas elípticas, con momento angular también cuantizado. Estas descripciones reproducían las energías de la radiación electromagnética emitida o absorbida por el átomo de hidrógeno en procesos que se interpretaron como saltos instantáneos de su electrón entre las órbitas permitidas, cada una de ellas asociada a una cierta energía, que resultaba también una magnitud cuantizada.

En 1926 Erwin Schrödinger desarrolló la mecánica cuántica ondulatoria, en la que las órbitas de los electrones son remplazadas por *orbitales*, que son funciones de onda con las que se puede calcular la probabilidad de encontrar el electrón en una cierta región del espacio al efectuar una medida, y que se obtienen a partir de un operador hamiltoniano que contiene las energías cinética y potencial coulombiana entre el electrón y el núcleo (apdo. 15.1). Al año siguiente Wolfgang Pauli introdujo en la descripción del átomo un momento angular adicional para los electrones, denominado *espín*, que es una propiedad intrínseca, es decir, que depende de la propia naturaleza de las partículas y no de su distribución de probabilidad espacial, y que se puede relacionar en algunos aspectos con un movimiento de rotación, en contraste con el movimiento de traslación que se asocia al momento angular orbital. Las primeras evidencias experimentales de la existencia del momento angular de espín aparecieron en un experimento realizado en 1922 por Otto Stern y Walther Gerlach, en el que un haz de átomos de plata se dirigía a través de un campo magnético no uniforme e incidía en una pantalla (apdo. 4.7.1), aunque la interpretación correcta de los resultados no llegó hasta unos años después. En 1928 Paul Dirac desarrolló una mecánica cuántica relativista, que incorporaba los principios de la relatividad especial de Einstein (apdo. 1.4), en la que el espín del electrón surge de forma natural y aparecen correcciones de la energía relacionadas con su velocidad orbital. Las interacciones entre los momentos magnéticos asociados a los momentos angulares de espín y orbital de los electrones y del núcleo, junto con los efectos relativistas, introducen pequeñas correcciones de las energías del átomo de hidrógeno que se pueden calcular mediante técnicas aproximadas, como la teoría de perturbaciones estacionarias (cap. 6); esta técnica, junto con el método variacional (cap. 7), se emplean también para el cálculo aproximado de las energías de átomos polielectrónicos y de moléculas.

Durante la segunda mitad del siglo XX se realizaron experimentos de colisiones entre partículas con energías cada vez mayores, que junto con los avances en las técnicas de detección de los productos resultantes, permitieron completar el conjunto de partículas elementales, tanto de materia como mediadoras de interacciones, de lo que hoy se conoce como Modelo Estándar (cap. 9). Un tipo de partículas de materia son los *quarks*, que siempre permanecen ligados entre sí formando partículas compuestas denominadas *hadrones* (cap. 10), entre los que se encuentran los constituyentes de los núcleos atómicos, los *nucleones* (protones y neutrones). El marco matemático del Modelo Estándar contiene las teorías cuánticas de campos de las

tres *interacciones fundamentales* que influyen en las estructuras microscópicas de la materia: la *electromagnética*, la *fuerte* y la *débil*. La interacción electromagnética (apdo. 9.3) es responsable de la estructura de átomos y moléculas, y de todos los fenómenos eléctricos, magnéticos, ópticos y químicos de la naturaleza. La interacción fuerte (apdo. 9.5) solo es relevante en la escala de partículas y núcleos y es responsable de la estructura de los hadrones, ya que liga sus quarks constituyentes, y también de la estructura de los núcleos, ya que liga los protones y neutrones a través de una interacción residual denominada *nuclear fuerte*. La interacción débil (apdo. 9.4) también es relevante únicamente en la escala de partículas y núcleos y es responsable de algunas de sus transformaciones, como por ejemplo la conversión de un protón en neutrón, o viceversa, que ocurre en las desintegraciones nucleares de tipo beta y que es origen de la radiación del mismo nombre.

En resumen, la materia ordinaria está constituida por un conjunto reducido de partículas elementales (electrón y dos tipos de quarks denominados u y d), que la teoría actual considera entidades puntuales, es decir, sin extensión espacial. Los quarks se unen entre sí mediante la interacción fuerte para formar partículas compuestas, entre ellas los nucleones, con un tamaño del orden de 10^{-15} metros (fermi). Los nucleones se ligan a su vez entre sí mediante la interacción nuclear fuerte para formar los núcleos atómicos (cap. 11 a 14), que alcanzan tamaños de unos pocos fermis. Los electrones se ligan a los núcleos mediante la interacción electromagnética para formar los átomos (cap. 15 a 17), con tamaños del orden de 10^{-10} metros (ángstrom). Por último, estos se unen entre sí de nuevo por interacción electromagnética, intercambiando o compartiendo electrones, para formar moléculas individuales (cap. 18 y 19), con tamaños del orden de unos pocos ángstroms y mayores, o para formar redes de diversos tipos (apdo. 18.9), que pueden alcanzar tamaños macroscópicos.

En la tabla 1.2 se resumen y comparan algunas de las principales características de las estructuras microscópicas de la materia, incluyendo el orden de magnitud típico de sus tamaños, masas, energías de ligadura promedio de sus constituyentes y energías de excitación de los niveles más bajos de sus espectros. Estos últimos pueden ser de varios tipos, por ejemplo excitaciones de espín, orbitales y radiales en nucleones (cap. 10); excitaciones de nucleón individual, vibracionales y rotacionales en núcleos (cap. 13); excitaciones electrónicas ópticas y de rayos X en átomos (cap. 17); y excitaciones electrónicas, vibracionales y rotacionales en moléculas (cap. 19).

1.7. Estudio experimental de las estructuras de la materia

En las estructuras de la materia pueden producirse *transiciones* entre diferentes estados de energía mediante la emisión o absorción de radiación electromagnética (apdo. 8.6). La energía E_{EM} del cuanto de radiación, el fotón, es la diferencia en valor absoluto entre las energías del estado inicial y del estado final del sistema, si se ignora su movimiento de retroceso al emitir o absorber el fotón. Esa energía corresponde a una cierta longitud de onda λ_{EM} y frecuencia f_{EM} (o frecuencia angular $\omega_{EM} = 2\pi f_{EM}$) de la radiación electromagnética asociada, relacionadas

Tabla 1.2. Para las estructuras microscópicas de la materia (nucleón, núcleo, átomo y molécula con $\lesssim$ 10 átomos) se indican los constituyentes, la principal interacción responsable de su ligadura y los órdenes de magnitud típicos aproximados del tamaño en metros (m), la masa total en MeV/c^2, la energía de ligadura promedio de los constituyentes en MeV y la energía de excitación de los niveles más bajos en MeV, en algunos casos para diferentes tipos de espectros: óptico atómico (O), rayos X atómico (X), rotacional molecular (R), vibracional molecular (V), electrónico molecular (E)

	Nucleón	**Núcleo**	**Átomo**	**Molécula**
Constituyentes	Quarks	Nucleones	Núcleo y electrones	Átomos
Interacción	Fuerte	Fuerte (nuclear)	Electromagnética	Electromagnética
Tamaño [m]	10^{-15}	$10^{-15} - 10^{-14}$	$10^{-11} - 10^{-10}$	$10^{-10} - 10^{-9}$
Masa [MeV/c^2]	10^3	$10^4 - 10^5$	$10^4 - 10^5$	$10^5 - 10^6$
Energía ligadura [MeV]	10^3	10	$10^{-6} - 10^{-1}$	$10^{-5} - 10^{-6}$
Energías espectro [MeV]	10^2	$10^{-1} - 10$	10^{-6} (O) 10^{-2} (X)	10^{-9} (R) 10^{-7} (V) 10^{-5} (E)

entre sí como:

$$E_{EM} = hf_{EM} = \hbar\omega_{EM} = \frac{hc}{\lambda_{EM}} \tag{1.19}$$

Además, la radiación electromagnética se puede caracterizar por su *multipolaridad* (apdo. 20.1), que se deduce del cambio de momento angular al pasar del estado inicial al estado final, y que determina la distribución angular de los fotones. En las transiciones electromagnéticas de átomos y moléculas la multipolaridad más probable es la de tipo dipolar eléctrico, que, si está permitida, es prácticamente la única que se observa. En los núcleos atómicos las transiciones electromagnéticas de desexcitación reciben el nombre de desintegraciones gamma (apdo. 14.4) y, aunque las de tipo dipolar eléctrico o magnético, si son posibles, son también las más probables, a menudo pueden observarse experimentalmente las de multipolos mayores.

El estudio *espectroscópico* de las estructuras de la materia consiste en el análisis de la radiación electromagnética que absorben o emiten, para determinar sus energías (o longitudes de onda o frecuencias), multipolaridades e intensidades relativas, y

relacionarlo con las propiedades de los estados de energía del sistema involucrados en las transiciones que originan la radiación.

Las estructuras de la materia también pueden estudiarse experimentalmente a través de procesos de *dispersión* o *scattering*, que consisten en colisiones entre las partículas de un haz, que actúan como proyectiles, y las estructuras que se quieren explorar, que actúan como blancos (que también pueden estar en movimiento). Tras la colisión, el proyectil se aleja del blanco con energía y momento diferentes en general a los de incidencia. Para analizar la estructura interna de un sistema de muy pequeño tamaño se necesita una resolución espacial muy alta, lo que se consigue con partículas asociadas a una longitud de onda de De Broglie muy corta, correspondiente a un momento muy grande (ec. 1.1). Análogamente, para analizar la dinámica interna de un sistema cuyos constituyentes se mueven a gran velocidad se requiere una resolución temporal muy alta, lo que se consigue con partículas que interactúan durante un lapso de tiempo muy breve; este fenómeno es análogo al efecto estroboscópico en física clásica, con el que puede examinarse un objeto que tiene un movimiento muy rápido, y usualmente periódico, usando destellos de luz muy cortos y frecuentes. Las partículas que reúnen estas características de corta longitud de onda, o alto momento, durante tiempos de vida cortos se denominan *virtuales* (apdo. 9.6). A nivel fundamental, las colisiones entre proyectiles y blancos en los procesos de dispersión se describen a través del intercambio de partículas virtuales, que no son observables directamente.

De acuerdo con el principio de incertidumbre, una alta resolución espacial, es decir, una incertidumbre pequeña en la posición de un sistema, está asociada a una incertidumbre grande en su momento (ec. 1.2), es decir, a un intervalo amplio que se extiende hasta valores altos. De manera análoga, una alta resolución temporal, que se puede relacionar con una incertidumbre pequeña en el tiempo de vida de un estado, está asociada a una incertidumbre grande en su energía (ec. 1.4), es decir, a un intervalo amplio que se extiende hasta valores altos. Así, el estudio de las estructuras microscópicas de la materia mediante procesos de dispersión requiere el análisis de muchas colisiones en un rango amplio de momentos y de energías, de donde se pueda extraer una descripción precisa de la estructura espacio-temporal interna del blanco a través del procedimiento matemático de la transformada de Fourier. En las partículas virtuales el momento y la energía son magnitudes independientes entre sí, ya que no cumplen la relación relativista de la ec. 1.11 (se dice que estas partículas se encuentran fuera de su capa de masas). La energía y el momento transferidos entre el proyectil y el blanco por las partículas virtuales se pueden determinar experimentalmente a partir de la energía y el momento del proyectil antes y después de su dispersión por el blanco, aplicando las leyes de conservación de estas cantidades.

Cuando, a diferencia de lo que ocurre en las dispersiones, las colisiones alteran la estructura del blanco y/o del proyectil, transformándolos en uno o más sistemas distintos a los iniciales, se habla de *reacciones* (de partículas, nucleares, químicas).

Una magnitud muy relevante en los procesos de colisión de cualquier tipo es la *sección eficaz*, que expresa la probabilidad de que se produzca la interacción entre el proyectil y el blanco, entendiendo esa probabilidad no en el sentido matemático (número adimensional entre 0 y 1), sino como una medida de la facilidad o de las po-

sibilidades de que tenga lugar el proceso. La sección eficaz puede interpretarse como un área circular centrada en el blanco y perpendicular a la dirección del proyectil, en la que este tiene que incidir para que se produzca la interacción. Tiene por tanto dimensiones de área, por ejemplo el barn (b), que equivale a 10^{-28} m^2. La sección eficaz es distinta para cada tipo de colisión, para cada tipo de proyectil y de blanco, y depende generalmente de la energía cinética relativa entre ellos.

Las colisiones a nivel microscópico, una vez fijadas unas ciertas condiciones iniciales en el proyectil y en el blanco, no ocurren necesariamente y de forma determinista, sino que poseen el carácter probabilístico propio de los fenómenos cuánticos. Por ese motivo los procesos de colisión se realizan experimentalmente con un haz de partículas que incide sobre un cuerpo macroscópico, que contienen respectivamente un gran número de proyectiles y de blancos. El ritmo de densidad de colisiones r (número de ellas que se producen por unidad de tiempo y por unidad de volumen) es proporcional al flujo de proyectiles del haz incidente ϕ (número de ellos que atraviesan una unidad de área por unidad de tiempo), a la densidad de blancos ρ (número de ellos por unidad de volumen) y a la sección eficaz entre el proyectil y el blanco σ (con dimensiones de área): $r = \phi\,\rho\,\sigma$.

Por último, las estructuras de la materia inestables pueden estudiarse experimentalmente a través de sus *desintegraciones*, que consisten en transformaciones espontáneas, es decir, no causadas por la colisión con proyectiles ni por ninguna otra influencia externa controlable. La magnitud más importante en estos procesos, análoga a la sección eficaz en las colisiones, es la *vida media*, que es el periodo de tiempo promedio durante el que el sistema permanece sin sufrir la transformación. Para deducir detalles de la estructura interna de un sistema que se desintegra espontáneamente o que se transforma en una reacción se analiza el tipo de fragmentos producidos, sus energías, momentos lineales, momentos angulares, etc.

1.8. Constantes y unidades habituales en física microscópica

Las constantes físicas que aparecen con más frecuencia en el estudio de las estructuras microscópicas de la materia son la velocidad de la luz en el vacío, $c = 3 \cdot 10^8$ m/s, la constante de Planck, $h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}$ J·s, o la constante de Planck reducida, $\hbar = h/2\pi = 1{,}055 \cdot 10^{-34}$ J·s (dadas en el Sistema Internacional de Unidades, donde m es metro, s es segundo y J es julio), y la constante de estructura fina, $\alpha = 1/137$. La permitividad eléctrica del vacío, ϵ_0, y la permeabilidad magnética del vacío, μ_0, se relacionan con las anteriores como $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ y $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$, donde e es la carga del electrón en valor absoluto.

En la tabla 1.3 se recogen las principales magnitudes y unidades habituales en este campo, y su conversión al Sistema Internacional (SI). Habitualmente se emplean múltiplos o submúltiplos de esas unidades, que se indican mediante prefijos como:

atto- (a) $\to 10^{-18}$	femto- (f) $\to 10^{-15}$	pico- (p) $\to 10^{-12}$
nano- (n) $\to 10^{-9}$	micro- (μ) $\to 10^{-6}$	mili- (m) $\to 10^{-3}$
kilo- (k) $\to 10^{3}$	mega- (M) $\to 10^{6}$	giga- (G) $\to 10^{9}$
tera- (T) $\to 10^{12}$	peta- (P) $\to 10^{15}$	exa- (E) $\to 10^{18}$

En el caso de la unidad de longitud, el metro, son habituales en estas escalas los submúltiplos 10^{-15} m (femtómetro o fermi, fm), 10^{-12} m (picómetro, pm), 10^{-10} m (ángstrom, Å, que no forma parte del SI) o 10^{-9} m (nanómetro, nm).

Tabla 1.3. Unidades típicas en el estudio de las estructuras microscópicas de la materia y su conversión al Sistema Internacional (SI)

Magnitud	Unidad habitual	Conversión al SI
Carga eléctrica	Carga del electrón en valor absoluto (e)	$1\ e =$ $= 1{,}602 \cdot 10^{-19}$ C (culombios)
Energía	Electronvoltio (eV)	1 eV $=$ $= (1{,}602 \cdot 10^{-19}$ C$) \cdot$ V $=$ $= 1{,}602 \cdot 10^{-19}$ J (julios)
Masa	Equivalente en masa del electronvoltio (eV/c^2)	$1\,\mathrm{eV/c^2} =$ $= 1{,}602 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{J}\,/\,(3 \cdot 10^8\,\mathrm{m/s})^2 =$ $= 1{,}783 \cdot 10^{-36}$ kg (kilogramos)
Longitud	Metro (m)	1 m
Tiempo	Segundo (s)	1 s

La combinación de constantes $\hbar c$, que aparece a menudo, toma en las unidades habituales el valor:

$$\hbar c = 197{,}3\,\mathrm{MeV} \cdot \mathrm{fm} = 197{,}3\,\mathrm{eV} \cdot \mathrm{nm} \tag{1.20}$$

En ocasiones se utiliza el *sistema natural de unidades*, en el que las constantes c y $\hbar$ son adimensionales y toman el valor 1. La energía se sigue midiendo en eV y las dimensiones y unidades del resto de magnitudes se obtienen a partir de leyes físicas que relacionan cantidades fundamentales: distancia recorrida y tiempo transcurrido a la velocidad de la luz en el vacío ($d = ct$), energía y su masa equivalente en un sistema aislado y en reposo ($E_0 = mc^2$), o energía de una partícula y la frecuencia de su onda asociada ($E = hf$). Así, en unidades naturales la energía, el momento lineal y la masa tienen unidades de eV, el espacio y el tiempo tienen unidades de eV^{-1}, la velocidad es adimensional, la aceleración tiene unidades de eV, la fuerza tiene unidades de eV^2, etc. Las unidades naturales se emplean a menudo en los desarrollos matemáticos, dado que aligeran notablemente la notación, pero los resultados finales se suelen convertir a las unidades habituales.

En física atómica y molecular se emplean también las *unidades atómicas* (a.u.) de Hartree, en las que la constante de Planck reducida $\hbar$ y la constante de la interacción coulombiana $4\pi\epsilon_0$ son adimensionales con valor 1, y se toma como unidad de carga eléctrica la del electrón en valor absoluto (e), como unidad de masa la del electrón ($m_e = 0{,}511$ MeV/c^2) y como unidad de longitud el radio de Bohr, que es la distancia más probable entre el electrón y el núcleo en el estado fundamental del átomo de

hidrógeno ($a_0 = \hbar c/(\alpha m_e c^2) = 0{,}0529$ nm). La unidad derivada de energía es el Hartree, que es la energía potencial del estado fundamental del átomo de hidrógeno ($E_h = \alpha^2 m_e c^2 = 27{,}21$ eV).

En espectroscopía atómica y molecular se suele tomar como magnitud fundamental la longitud de onda de la radiación electromagnética, medida típicamente en cm, mm, μm, nm o Å. Las constantes c y h (no $\hbar$) suelen tomarse adimensionales con valor 1. En este sistema, la energía y la frecuencia de la radiación se miden en unidades de longitud inversas, por ejemplo cm^{-1} (de modo que el valor de la frecuencia f coincide con el del número de onda $\tilde{\nu} = 1/\lambda$). Para convertir una energía expresada en cm^{-1} a una expresada en eV se divide entre 8065, que proviene de multiplicar por el factor hc en unidades eV·cm:

$$hc = 2\pi\, 197{,}3\ \mathrm{MeV} \cdot \mathrm{fm} = 1{,}240 \cdot 10^{-4}\ \mathrm{eV} \cdot \mathrm{cm} = (1/8065)\ \mathrm{eV} \cdot \mathrm{cm} \tag{1.21}$$

Para convertir una frecuencia expresada en cm^{-1} a una expresada en Hz (s^{-1}) se multiplica por $3 \cdot 10^{10}$, que es el factor c en unidades cm/s.