Rev.R.Acad.Cienc.Exact.Fís.Nat. (Esp)
Vol. 109, Nº. 1–2, pp 33–50, 2017
XIX Programa de Promoción de la Cultura Científica y Tecnológica

A propósito del potencial de paredes infinitas: el joven Gamow, Schrödinger en España y algunos comentarios matemáticos

Jesús Ildefonso Díaz
Real Academia de Ciencias e Instituto de Matemática Interdisciplinar de la Universidad Complutense de Madrid

1. INTRODUCCIÓN

El "principio de incertidumbre" de W.K. Heisenberg (1901–1976) es una de las joyas que caracterizan a la Mecánica Cuántica. Solamente en algunos casos limitados es posible mostrar que es nula la probabilidad de encontrar una partícula elemental sobre ciertas zonas del espacio lo que "casi vulnera" el citado principio. Esto equivale a la certeza de saber que esa partícula no invade el exterior de una cierta zona del espacio.

Esta certeza parcial se suele ilustrar en los tratados elementales de la Mecánica Cuántica mediante la consideración del llamado "potencial de paredes infinitas" para la ecuación de E. Schrödinger (1887-1961). El objeto del presente artículo, de carácter divulgativo, es presentar una serie de comentarios, algunos de ellos de una naturaleza histórica y otros de naturaleza matemática, para recordar brevemente el tratamiento de este sencillo ejemplo e incidir en la pequeña ambigüedad que se presenta en el tratamiento matemático de ese "potencial ideal"[2].

Curiosamente, pese a tratarse de ejemplos temprana y largamente estudiados por la Mecánica Cuántica, no ha sido hasta hace unos pocos años que se ha llevado a cabo una revisión actualizada de la mencionada "certeza parcial" y además por medio de argumentos insospechados en ese contexto[3]. En la siguiente Sección recordaremos la enorme trascendencia que tuvo la propuesta del potencial de paredes verticales debida, en 1928, a un recién licenciado, George Gamow (1904-1958) que más tarde también llevaría a cabo otras contribuciones cruciales para la ciencia actual. En particular, ilustraremos como el trabajo de Gamow de 1928, concluyendo, por primera vez, el llamado "efecto túnel" significó, entre otras muchas cosas, el embrión de los revolucionarios "microscopios STM" que permitieron el desarrollo de la Nanociencia y de la Nanotecnología[4].

En la sección 3 nos referiremos al potencial de paredes infinitas, propuesto por el que sería Premio Nobel en 1977, Sir Nevill Francis Mott (1905-1996), en su libro[5] de 1930, *An Outline of Wave Mechanics*, como una herramienta de gran valor pedagógico.

---

1 Investigaciones parcialmente financiadas por el proyecto Ref.MTM2014-57113-P de la DGISPI y el Grupo de Investigación MOMAT (Ref. 910480) de la Universidad Complutense de Madrid.

2 Como veremos, tal función potencial toma valores infinitos y al tratar el problema como límite de los llamados "potenciales de paredes finitas" surgen términos inesperados.

3 Una vez más se corrobora lo que el Premio Nobel de Física de 1963, Eugene Paul Wigner (1902-1995), mostró con gran elegancia en su famoso artículo: E.P., Wigner. The unreasonable effectiveness of mathematics in the natural sciences, Comm. Pure Appl. Math., 13, 1960, pp. 1-14.

4 Para diferentes ilustraciones y comentarios sobre *Microscopios de Efecto Túnel* (en inglés *Scanning tunneling microscope* o STM), debidos en 1981 a G. Binnig y H. Rohrer (de IBM Zürich), lo que les valió el Premio Nobel de Física de 1986, enviamos al lector a la obra *Nanociencia y Nanotecnología en Defensa,* http://publicaciones.defensa.gob.es/inicio/libros/libro/nanociencia-nanotecnologia-y-defensa.-nº142.

5 Cambridge University Press, 1930.

Figura 1. George Gamow (1904-1958).

Figura 2. Sir Nevill Francis Mott (1905 –1996).

A continuación, en la Sección 4, a modo de *intermedio*, llevaremos a cabo diversos comentarios de tipo histórico, principalmente concernientes a las dos visitas realizadas por Schrödinger a España en 1934 y 1935, sobre las que he podido encontrar alguna nueva documentación en la Academia de Ciencias. Finalizaremos el artículo con la Sección 5, en la que me referiré a otras certezas parciales que se han obtenido de manera rigurosa para ciertos potenciales singulares, y que concluirá con unos comentarios finales de diferente naturaleza.

2. EJEMPLOS PIONEROS DE SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER: EL POTENCIAL DE PAREDES FINITAS DE GAMOW

Con intención de profundizar en trabajos de Max Plank (1858-1947) y Niels Bohr (1885-1962), el austriaco E. Schrödinger propuso en 1925, una ecuación en derivadas parciales con valores complejos, que causó enseguida un gran impacto (de hecho, transformó el mundo de la Física) pero que también causó un cierto “desconcierto inicial[6]” ante la ausencia de soluciones simples explicitas.

Figura 3. Erwin Schrödinger (1887-1961)

La ecuación de Schrödinger se puede formular en los siguientes términos:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(x)\psi, \text{ en } (0,\infty)\times\mathbb{R}^N$$

donde

$\hbar > 0$ constante renormalizada de Plank,
m masa de la particula elemental,
$V(x) \in \mathbb{R}$ potencial de la fuerza externa

$$\mathrm{i} = \sqrt{-1},$$

$\psi : [0,\infty)\times\mathbb{R}^N \to \mathbb{C}$ function de onda
(L. de Broglie 1924: dualidad onda-partícula)

$$\Delta u = \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial^2 u}{\partial x_i{}^2}$$

En lo que sigue, algunas veces me limitaré, por simplicidad en la exposición, a una dimensión espacial, N=1. Una buena parte de los primeros ejemplos concretos correspondían a los llamados estados estacionarios (*bound states*) de la ecuación de Schrödinger

$$\psi(x,t) = e^{-iEt}u(x).$$

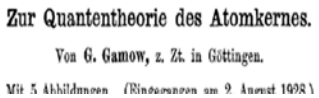
Para los propósitos de este trabajo, los valores exac-

[6] Ese fenómeno de “desconcierto inicial” es propio de aquellas nociones que significan un cambio abrupto en ciencia. Por ejemplo, ya sucedió en los alrededores de 1750 con la introducción de la primera ecuación en derivadas parciales (la ecuación de ondas) y surgiría también en los años 70 del pasado siglo con la aparición de los fractales de la mano de Benoît Mandelbrot (1924-2010).

tos de m y } no son relevantes por lo que supondremos por simplicidad en la exposición que m = 1 y } = 1. Además, en matemáticas, es más usual denotar a los autovalores por λ en vez de por E. Así, los estados estacionarios u(x) deben resolver el problema elíptico

$$-\Delta u + V(x)u = \lambda u \quad \text{en todo el espacio.}$$

Motivado por un trabajo de 1927 de Ernest Rutherford (1871-1937), sobre dispersión de rayos alfa en Uranio, un entonces jovencísimo recién graduado, G. Gamow (Odessa (Ukrania) 1904-Boulder (Colorado (USA), 1968) analizó, tan solo un año más tarde, en 1928, el caso unidimensional del potencial de Coulomb[7].


Zur Quantentheorie des Atomkernes.

Von G. Gamow, z. Zt. in Göttingen.

Mit 5 Abbildungen. (Eingegangen am 2. August 1928.)

Figura 4. Artículo de Gamow de 1928.

Al parecer, por primera vez en la literatura (y desde entonces repetido en todos los libros de texto de Mecánica Cuántica), Gamow, con tan solo 24 años, tuvo la genial idea de reemplazar ese potencial por otro más simple, pero conteniendo las principales dificultades: el potencial (discontinuo) de paredes verticales (denominado como *well potential* en inglés).

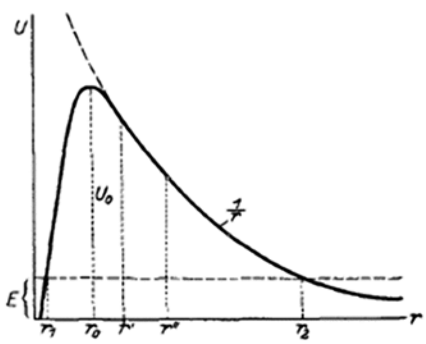


Figura 5. Potencial considerado por Gamow de 1928.

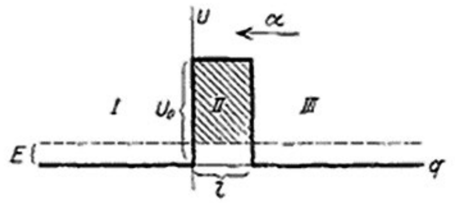


Figura 6. Potencial de paredes finitas propuesto por Gamow.

El trabajo de Gamow, de hecho, fue simultaneo (incluso una semana posterior) al publicado en la revista *Nature* conjuntamente por el inglés R.F. Gurney (1898-1953) y el norteamericano E. Condon (1902-1974)[8]. Gamow comentó en su póstuma autobiografía[9], que la simultaneidad de su descubrimiento con otros autores y su radicalmente diferente aproximación al tema pudieron ser las causas de que ninguno de los tres recibiesen el premio Nobel por tan sobresaliente aportación.

En su artículo de 1928, Gamow consideró el pozo de potencial finito resolviendo el problema en un sentido débil: la solución de la ecuación en derivadas parciales no podía ser de clase C^2 (pues la función potencial es discontinua) y solo cabe esperar que sea de clase C^1. Curiosamente, la noción de solución empleada por Gamow es coherente con la noción de "solución débil" introducida varios años más tarde por Jean Leray (1906-1998), Sergei Sobolev (1908-1989) y Laurent Schwartz (1915-2010).

En su autobiografía, *My World Line,* antes citada, cuenta[10] que él no sentía una especial atracción por las matemáticas y que solo conocía rudimentos de *Calculus*, ecuaciones en derivadas parciales y temas afines, De hecho, comenta también que pidió a un colega matemático ruso N. Kotshchin (que estaba pasando también ese verano en Göttingen) que le calculase una cierta integral singular que él necesitaba para acabar su artículo de 1928. Gamow no llegó a Göttingen, en 1928, invitado por nadie en especial, sino con una beca

[7] El artículo me fue traducido del alemán por mi compañero de departamento Uwe Brauer.

[8] Ver también el artículo por esos autores, detallando la nota de *Nature* de 1928, Quantum Mechanics and Radioactive Disintegration, *Physical Review*, 33, 2, 127-140, 1929. En ese cuidado artículo también trabajan con soluciones débiles y con potenciales de paredes finitas para los que muestran el efecto tunel, aunque no mencionan el trabajo de Gamow. Concluyen presentando finas experiencias a las que aplican los resultados teóricos.

[9] *My World Line. An informal autobiography*, The Viking Press, New York, 1970.

[10] Página 59.

genérica para pasar allí ese verano por recomendación de un profesor suyo de su licenciatura en Leningrado.

Como ya hemos comentado, en ese trabajo genial, tras simplificar el potencial considerando el de paredes finitas, Gamow, del que me declaro gran admirador, mostró por primera vez el llamado “efecto túnel” que ha sido la base de la generación de microscopios denominados “de efecto túnel”. El problema presenta muchas similitudes a cuando se supone que el potencial es de tipo “pozo” en vez de tipo “pared”

$$V(r) = \begin{cases} V_+, & r \notin (-R, R), \\ V_0, & r \in (-R, R) \end{cases}$$

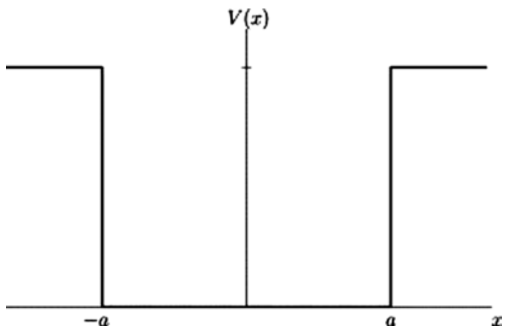


Figura 7. Potencial de tipo pozo de paredes finitas.

En el caso de la Mecánica Clásica, el plano de fases para un sistema unidireccional conservativo con una fuerza de potencial similar al pozo de paredes finitas, pero regularizado para evitar singularidades, sería como lo que se ilustra[11] en la siguiente figura:

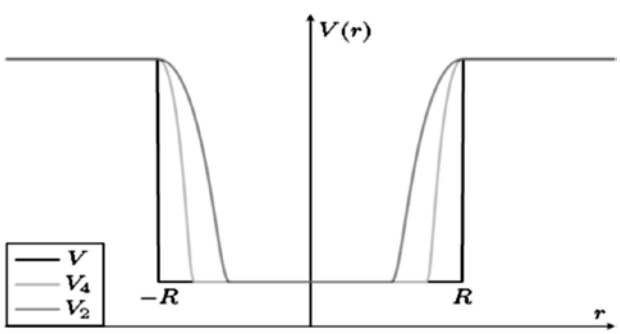


Figura 8. Potencial discontinuo de paredes finitas y su regularización.

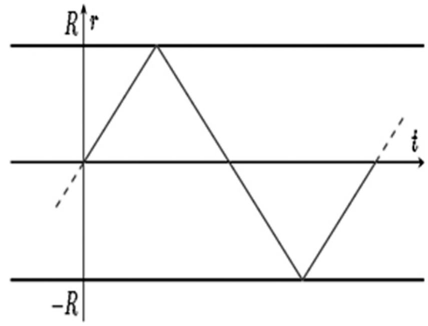


Figura 9. Representación de la trayectoria temporal de la partícula para energía total intermedia.

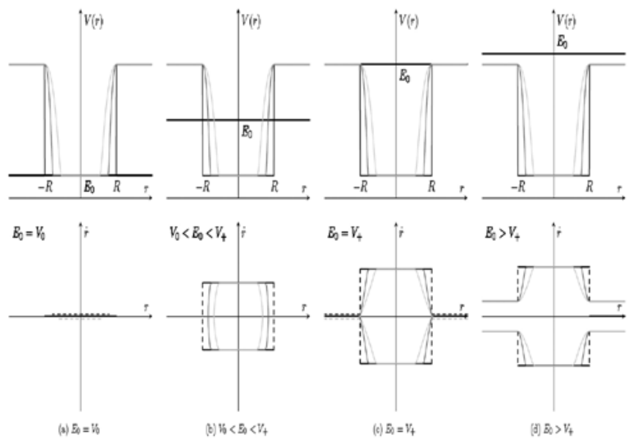
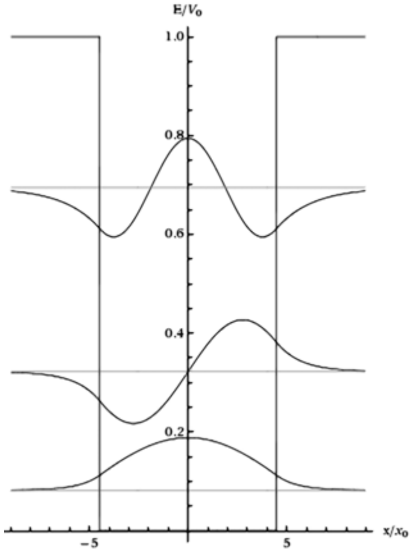
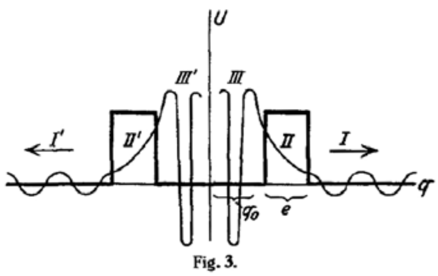


Figura 10. Representación del plano de fases para diferentes energías totales.

Como puede apreciarse, cuando se regulariza el potencial, la partícula no “rebota en las paredes” (a diferencia de lo que se suele comentar en algunos libros de texto de Mecánica Clásica, en los que, además, rara vez se detalla ese estudio). Sin embargo, Gamow mostró en 1928 que en el caso cuántico la partícula penetraba más allá de las paredes (incluso para bajas energías: menores que la altura del pozo).

[11] Extraído de mis notas de clase del curso de Mecánica y Ondas 2016/2017 de 2º de la Facultad Matemáticas de la UCM. Fue explicando este ejemplo, en el curso 2012-2013, cuando me di cuenta de algo que comprobé con asombro que era escasamente advertido en la literatura.





Figuras 11 y 12. Representación del efecto túnel. La figura de la derecha debida a Gamow.

En el caso cúantico aparece un espectro discreto (de hecho un conjunto numerable de autovalores, es decir, de energías λ=E).

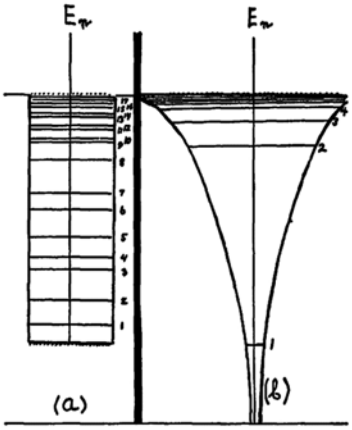


Figura 13. Representación por Gamow de las energías discretas para ese problema.

Quizás sea este el momento de ofrecer unas pinceladas sobre la vida de Gamow: Gueorgi Antonovich Gamow, nació en 1904 en Odesa (entonces Rusia, hoy Ukrania), estudió primero en la Universidad de Novorossia, en Odesa, pero en 1922, interesado en estudiar Física Teórica, se trasladó a la Universidad de Leningrado (hoy San Petersburgo). Allí coincidió e hizo gran amistad con dos colegas de talla excepcional[12]: Dmitri Ivanenko y Lev Landau.

Figura 14. Foto de 1926 de Gamow con otros estudiantes de la Universidad de Leningrado.

Sus resultados de 1928 en Göttingen, investigando el núcleo atómico, fueron la base de su tesis doctoral. Entre 1928 y 1931 trabajó en el Instituto de Física Teórica de la Universidad de Copenhague (con Niels Bohr) gracias a una beca donada por la compañía de cervezas Carlsberg. Después realizó una breve estancia, en 1929, para trabajar con Ernest Rutherford, en el Cavendish Laboratory de Cambridge.

Tras su regreso a la Unión Soviética, el curso 1932-1933, aprovechando un viaje a Bruselas, para asistir en calidad de representante ruso al Congreso Solvay, en Octubre de 1933, Gamow emigró clandestinamente a Alemania con su esposa. Realizó entonces unas bre-

[12] El grupo se autodenominaba como *Los Tres Mosqueteros*.

ves estancias en el laboratorio de Maríe Curie, en el Cavendish Laboratory de Cambridge, y también en el instituto de Bohr en Copenhague. Tras viajar a Estados Unidos, obtuvo una plaza de profesor en la Universidad George Washington donde produjo otro famoso artículo firmado con E. Teller (1908-2003), en 1936, mejorando resultados previos de Fermi sobre decaimientos nucleares beta por cambio en el momento angular o spin.

Hacia mediados de la década de 1940-50, Gamow cambió de tema de trabajo de nuevo. Como ya indiqué antes, Gamow se consideraba bastante torpe con las matemáticas. En su autobiografía comentó que cuando creía que un tema empezaba a complicarse, desde el punto de vista de los cálculos matemáticos, procuraba cambiar a otro que requiriese una matemática más sencilla. Su nuevo tema de investigación fue la Cosmología Física y en particular el estudio del origen del universo y de su evolución. Predijo la temperatura de la radiación cósmica de fondo de microondas (junto a R. Alpher (1921–2007) y R. Herman (1914–1997) prediciendo la *Teoría del Big Bang*, que años más tarde, en 1964, sería confirmada por los físicos estadounidenses Arno Allan Penzias (1933-) y Robert Woodrow Wilson (1936-) al descubrir por accidente el “ruido de fondo” (lo que les valió la concesión del Premio Nobel en 1978).

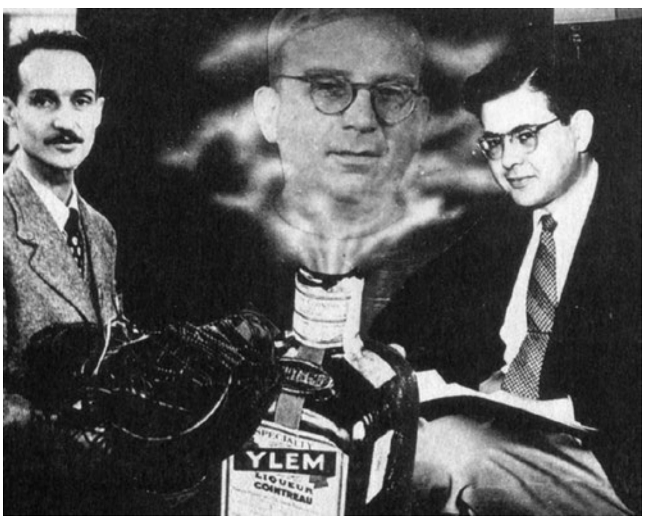


Figura 15. Foto de 1949 de Gamow (simulando emerger de una botella) junto a Alpher y Herman.

En 1948 publicó en *Physical Review* «El origen de los elementos químicos», firmado por R. Alpher, H.A. Bethe (1906 –2005) y Gamow. El trabajo lo habían llevado a cabo Gamow y Alpher, pero Bethe, un reputado físico teórico de la Universidad de Cornell, ganador del premio Nobel de Física en 1967, no sabía nada del mismo. Gamow lo hizo figurar como autor (pese al desconocimiento inicial de Bethe) porque de esa manera las iniciales de los autores coincidirían con las de los tres procesos radiactivos básicos (alfa, beta y gamma) y con las tres primeras letras del alfabeto griego, lo que le resultaba especialmente divertido. Su omnipresente sentido del humor impregnó su personalidad desde sus años universitarios.

Algunos años más tarde se enroló en lo que el mismo denominaba “una extravagante desviación en el campo de las ciencias biológicas”. Fue entonces cuando, poco después de que F.H.C. Crick (1916-2004) y J.D. Watson (1928-) descubrieran en 1953 la estructura de doble hélice de la molécula de ADN, Gamow mostró en 1954 cómo los cuatro tipos de bases presentes en el ADN forman los 20 aminoácidos constituyentes de las proteínas.

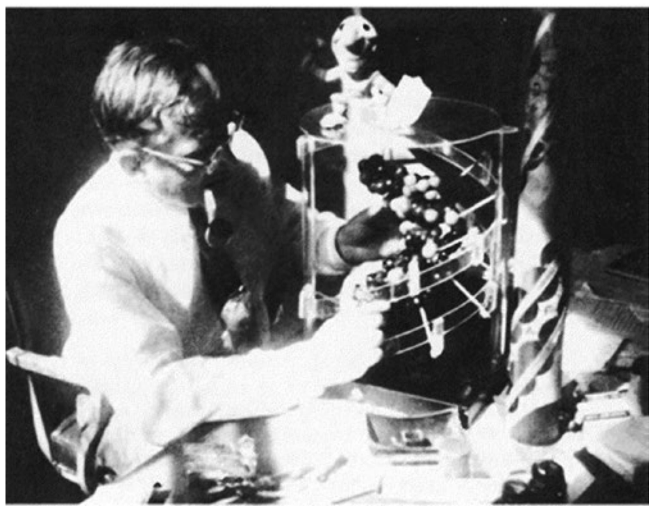


Figura 16. Foto de 1954. Gamow con un modelo de DNA.

Además de su relevancia como investigador, Gamow destacó como divulgador científico y obtuvo en 1956 el premio Kalinga, otorgado por la Unesco. Entre sus publicaciones más conocidas en este campo[13] están los cuatro libros sobre las *aventuras del Sr. C.G.H.*

[13] Véase también su famoso libro *Biografía de la Física,* Alianza Editorial, Madrid, 1996.

Tompkins (un empleado de banca aficionado a la física, cuyas iniciales responden a tres de las constantes universales fundamentales: c, la velocidad de la luz en el vacío, G, la constante de gravitación universal, y h, la constante de Planck). Gamow publicó también otros veinte libros más de divulgación de la física. En 1955, se trasladó a la Universidad de Colorado, estado en el que falleció en 1968.

Antes de acabar esta Sección, a propósito de la visita de Gamow al Göttingen, Institut für Theoretische Physic, donde produjo su revolucionario artículo de 1928, merece la pena comentar algo sobre la excelencia de ese centro. El instituto en esa época estaba dirigido por Max Born (1882-1970) y era el centro de la ciencia en Alemania[14].

Figura 17. Institut für theoretische Physics de Göttingen.

La Universidad de Göttingen produjo una especial concentración en "ciencias naturales", especialmente en matemáticas. Carl Friedrich Gauss enseñó allí en el siglo XIX. Bernhard Riemann, Peter Gustav Lejeune Dirichlet y una cantidad importante de matemáticos hicieron sus contribuciones a las matemáticas en esa universidad. En 1900, David Hilbert y Felix Klein atrajeron a matemáticos de todo el mundo, lo que convirtió a Göttingen en la meca mundial de las matemáticas a principios del siglo XX[15].

3. EL POTENCIAL DE PAREDES INFINITAS: VALOR PEDAGÓGICO Y AMBIGÜEDAD EN SU TRATAMIENTO

En los libros de texto actuales de Mecánica Cúantica, tras el potencial de paredes finitas, se pasa a considerar el llamado *potencial de paredes infinitas* dado mediante la siguiente definición:

$$V_\infty(x:R,V_0)=\begin{cases} V_0 & \text{if } x\in(-R,R),\\ +\infty & \text{if } x\notin(-R,R),\end{cases}$$

¿Cómo interpretar ese potencial (y más aún la fuerza generada por él) toda vez que toma el valor infinito sobre todo el espacio excepto sobre un subconjunto compacto del espacio total? Hoy día, matemáticamente, se le podría dar un sentido riguroso (técnicamente muy sofisticado) por medio de la teoría de las medidas de Borel[16]. Sin embargo, hay formas más directas de abordar esa cuestión.

En la mayoría de los libros de texto se emplea el siguiente argumento: el producto V(x)ψ(x,t) *solo tiene sentido* (allí donde V(x)=+∞) imponiendo que se cumpla que ψ(x,t)=0 para esos valores de x. Pero este es un argumento equívoco en matemáticas como lo muestra la famosa regla de l'Hôpital que permite deshacer ese tipo de indeterminaciones.

Un camino más natural para definir la solución es "pasar al límite" en una familia de potenciales de paredes verticales de altura q, cuando $q\to+\infty$ y pasar también al límite en las sucesión de soluciones de las correspondientes ecuaciones de Schrödinger. En algunos libros de texto se menciona este procedimiento, pero no parece estar bien justificado pues no se indica el sentido (es decir, la topología) en la que se produce la convergencia de las soluciones. Hoy sabemos[17] que esa convergencia se produce en el espacio de Sobolev H^1 Se puede mostrar rigurosamente que el problema tiene un espectro discreto numerable y

[14] Su historia pasada acumula muy distinguidos miembros, entre ellos 47 Premios Nobel.

[15] Una impresionante galería de personajes ilustres relacionados con el Institut für theoretische Physics de Göttingen puede obtenerse por ejemplo en *Wikipedia*.

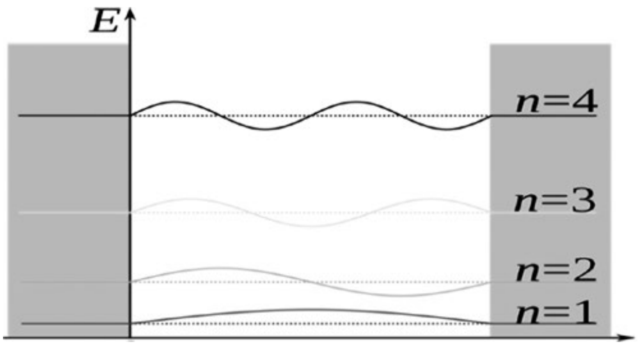
[16] F.É.J. Émile Borel (1871-1956). Existen monografías (como la de A. C. Ponce, *Elliptic PDEs, Measures and Capacities*, Tracts in Mathematics 23, European Mathematical Society (EMS), Zürich, 2016) tratando la ecuación estacionaria de Schrödinger con medidas de Borel como potenciales.

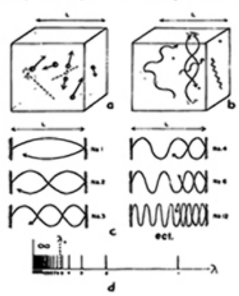
[17] J.I. Díaz, On the ambiguous treatment of the Schrödinger equation for the infinite potential well and an alternative via flat solutions: the one-dimensional case. *Interfaces and Free Boundaries*, 17 (2015), 333–351.

que en términos de la formulación física completa se escribe como

$$E_n = \frac{h^2}{2m}\lambda_n$$

con lo que se produce esa certeza parcial que contrasta con el Principio de incertidumbre de Heisenberg: la función de onda es nula fuera del compacto [-R, R] en el que el potencial es finito (en el caso unidimensional).





Figuras 18 y 19. Espectro numerable y certeza parcial. La figura de la derecha se debe a Gamow.

Como señala Gamow en su libro de 1966, *Thirty years that shook Physics*: *The Story of Quantum Theory*, esa certeza parcial es un caso excepcional**:** la partícula ha de estar en el pequeño compacto (-R,R) pero eso es compatible con la incertidumbre general señalada por Heisenberg. Gamow se pregunta: ¿Qué ocurriría si un electrón fuera disparado en una cámara blindada? He aquí como ilustra Gamow (en su página 115) el Principio de incertidumbre:

Según los textos clásicos de mecánica, la partícula (el electrón) disparada seguiría una trayectoria parabólica debido al campo gravitatorio. Pero, de hecho, en el momento en que un fotón chocase contra él, el electrón retrocedería y cambiará su vector velocidad. Observando la partícula en puntos sucesivos de su movimiento, veríamos que el electrón seguiría una trayectoria en zigzag a causa de los impactos de los diversos fotones. Pero podríamos imaginar que tenemos un instrumento, idealmente flexible, que nos permite aminorar los impactos al reducir la energía de los fotones (lo que se puede hacer empleando luz de menor frecuencia). De hecho, llegando al límite de una frecuencia infinitamente baja (lo que sería posible en nuestro aparato ideal) podemos hacer la perturbación del movimiento del electrón tan pequeña como deseamos. Pero entonces surge una nueva dificultad. Cuanta más larga es la onda de luz menos seremos capaces de determinar el objeto a causa del efecto de difracción. Así, pues, no podemos encontrar la posición exacta del electrón en un instante dado. Heisenberg demostró que el producto de las incertidumbres sobre posición y velocidad nunca puede ser menor que la constante de Planck dividida por la masa de la partícula.

Pese a lo que se pueda pensar inicialmente, el problema de paredes infinitas no es atribuido a Gamow sino a N.F. Mott que lo introdujo en su libro *An Outline of Wave Mechanics*, Cambridge University Press, 1930, quien, en su página 59, habla de "una caja perfecta tal que os electrones se pueden reflejar sin pérdida de energía". Más tarde, en su libro de 1966 antes citado, Gamow se refiere al potencial de paredes infinitas[18].

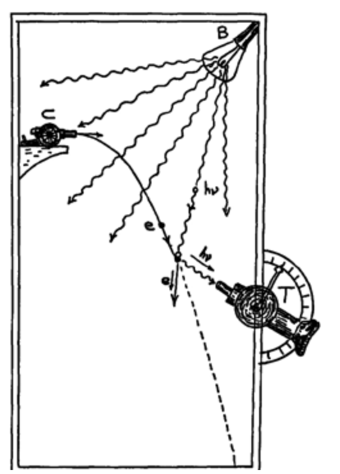


Figura 20. Disparo de un electrón en el interior de una cámara blindada según Gamow.

Hoy día ya se cuenta con excelentes artículos panorámicos, con 148 referencias sobre el tema como, por ejemplo, el artículo M. Belloni and R.W. Robinett, The infinite well and Dirac del-

[18] Al que también se refiere como *Jeans' cube* y menciona que cubos ideales de ese tipo se pueden imaginar en dinámica de gases.

ta function potentials as pedagogical, mathematical and physical models in quantum mechanics, *Physics Reports* 540 (2014) 25—122. También es especialmente recomendable a este respecto el excelente libro de texto de D.J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, New York, 1995, quien refiriéndose al potencial de paredes infinitas escribe:

Este potencial es muy artificial, pero les insto a tratarlo con respeto. Pese a su simplicidad, o más bien precisamente debido a su simplicidad, sirve maravillosamente como banco de prueba accesible para los finos artilugios que encontraremos más adelante.

Es oportuno recordar ahora la interpretación probabilista, debida a M. Born (1928), a partir de la función de onda compleja solución de la ecuación de Schrödinger. Podemos suponer que esa función de onda es de cuadrado integrable

$$\mathrm{N} = \int d^3r\,|\Psi(r,t)|^2 < +\infty$$

$$|\Psi(r,t)^2| = |\mathrm{Re}\,\Psi(r,t)|^2 + |\mathrm{Im}\,\Psi(r,t)|^2$$

Y que podemos renormalizarla de manera que la probabilidad de que la partícula se encuentre en una región *R* viene dada por

$$\frac{1}{N}\int_R d^3r\,|\Psi(r,t)|^2$$

Recordemos también que se tiene una nueva formulación de lo que son las variables de la Mecánica Clásica ahora escritas en lenguaje de operadores diferenciales.

Variables clásicas	Variables cuánticas
r_{cl}	r
p_{cl}	$p = -i\hbar\nabla$
$\frac{p_{\mathrm{cl}}^2}{2m}$	$\frac{p^2}{2m} = \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m}$
$H_{\mathrm{cl}} = \frac{p_{\mathrm{cl}}^2}{2m} + V(r_{\mathrm{cl}}, t)$	$H = \frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m} + V(r_{\mathrm{cl}}, t)$

Figura 21. Cuadro de variables clásicas y cuánticas.

Definiendo las incertidumbres de la posición y del momento mediante,

$$\Delta x = \left[\int d^3r\,|\Psi(r,t)|^2 (x - \langle x\rangle)^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\langle x\rangle = \int d^3r\,|\Psi(r,t)|^2 x$$

$$\Delta p_x = \left[\int d^3r\,\Psi^*(r,t)\left(-i\hbar\frac{\delta}{\delta x} - \langle p_x\rangle\right)^2 \Psi(r,t)\right]^{1/2}$$

$$\langle p\rangle = \int d^3q\,|\widetilde{\Psi}(q,t)|^2 q$$

el Principio de incertidumbre asegura que

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2},$$

Observemos que la certeza parcial de que $\psi(x,t)=0$ para los valores de x en los que $V(x)=+\infty$, es decir fuera de un "pequeño compacto" es perfectamente compatible con la incertidumbre general pero limita esa incertidumbre a lo que ocurre dentro de la región compacta donde V(x) toma valores finitos. Es decir, la probabilidad de encontrar la partícula fuera de ese compacto es, con total certeza, nula y por tanto la partícula ha de estar en ese compacto.

Entrar de lleno en la interpretación filosófica que genera el anterior principio, en el dilema *determinismo / azar* podría ser el objeto de otra conferencia enteramente distinta. Numerosos textos y congresos han sido dedicados a tal fín[19].

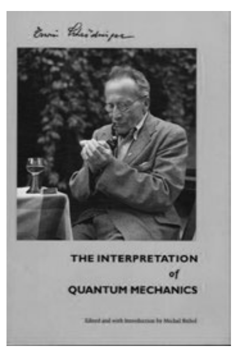


Figura 22. Uno de los muchos textos sobre la interpretación de la Mecánica Cuántica.

[19] Véase, por ejemplo, *E. Schrödinger. The Interpretation of Quantum Mechanics*, edited by M. Bitbol, Ox Bow Press, 1995.

Dándole la palabra al propio Schrödinger[20], éste no identifica como tantos otros, el indeterminismo y la teoría cuántica, en primer lugar, porque ya había parcelas de la Física que eran indeterministas en cierto sentido antes de que surgiera la tesis del indeterminismo cuántico y, en segundo lugar, porque la culminación de la teoría y sus propios descubrimientos dentro de ella supusieron para él una reconversión hacia el determinismo en varios aspectos relevantes

La creencia en vínculos causales objetivos y universalmente necesarios es el postulado más utilizado, pero un examen atento de la evolución de la ciencia en el siglo XIX arroja como resultado que no es la necesidad causalista, sino el azar acausal, la fuente más fructífera y eficaz de nuevas leyes:

> "*La investigación física ha demostrado clara y definitivamente que el azar es, por lo menos en la abrumadora mayoría de los procesos naturales, la raíz de esa regularidad y de esa invariabilidad que nos han llevado a establecer el postulado de la causalidad universal, en vista de su estricto ajuste a las leyes*".

La paradoja se explica teniendo en cuenta que la Termodinámica y la Mecánica Estadística fueron las más preciadas conquistas de la ciencia en el tránsito del siglo XIX al XX, y que en estos ámbitos las leyes encontradas eran de naturaleza estadística y dependían de la existencia de distribuciones azarosas, indiscriminadas, en poblaciones numerosas de casos particulares.

Pero regresemos al caso concreto del ejemplo del potencial de paredes infinitas y la ambigüedad que se produce en su presentación usual en los libros de texto. Es un asunto muy sutil. Como hemos dicho, todo comienza por que la noción de solución ha de venir bien justificada matemáticamente, y así, por ejemplo, una función es solución del potencial de paredes infinitas si es límite (en algún espacio funcional) de las soluciones de potenciales de pozos de altura finita cuando hacemos que esa altura converja a infinito. La sorpresa es que, pese a que se puede mostrar rigurosamente[21] que se puede pasar al límite en esa sucesión de soluciones de la ecuación de Schrödinger para esa familia de potenciales, la función resultante no cumple realmente la ecuación de Schrödinger en todo el espacio, dado que en la ecuación que satisface la función límite aparecen unas singularidades (en forma de Deltas de Dirac) concentradas en los bordes del dominio donde está definido de manera finita el potencial de paredes infinitas. Por ejemplo, para la autofunción u_n de autofunción E_n se obtiene que

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_n}{dx^2}+V(x)u_n=E_nu_n+k_n(R)\delta_{\{R\}}-k_n(-R)\delta_{\{R\}},$$

con

$$k_n(-R)=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\sqrt{2}}{R^{3/2}}n\pi \quad k_n(R)=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\sqrt{2}}{R^{3/2}}n\pi(-1)^n$$

He tenido la ocasión de mostrar los detalles en diferentes conferencias de investigación[22] y confieso que al principio estaba muy inquieto sobre la posible reacción del público especialista dado que el tema es considerado como básico y consolidado. La presencia de tales singularidades en las derivadas de la solución no suele ser señalada más que en algunos pocos textos[23] y en todo caso, yo no había encontrado ningún tipo de comentarios sobre cómo evitar este hecho y tener, a la vez, el efecto de lo que hemos llamado antes de la "certeza parcial", hasta que fue publicado la edición 6ª del excelente libro coordinado por Carlos Sánchez del Río.[24]

Figura 23. Publicado en enero de 2017.

---

20 E. Schrödinger; ¿Qué es una ley de la naturaleza?, F.C.E., México, 1975.

21 J.I. Díaz, On the ambiguous treatment of the Schrödinger equation for the infinite potential well and an alternative via flat solutions: the one-dimensional case. Interfaces and Free Boundaries, 17 (2015), 333–351.

22 Tours (2012), Valencia (2013), Cambridge (2014), Nápoles (2015), Tenerife (2016), RAC (2016), Bilbao (2017) y Poitiers (2017).

23 Entre ellos están los textos de A. Galindo y P. Pascual, Mecánica Cuántica I, II EUDEMA, Madrid 1989; Problemas de Mecánica Cuántica, EUDEMA Madrid 1989, y Quantum Mechanics I, II, Springer Verlag, Berlín 1990-1991.

24 C. Sánchez del Río, Física Cuántica, 6ª edición, Pirámide, Madrid, 2017.

Entre las novedades de esta 6º edición, en la página 232, se menciona[25]:

Las auto funciones encontradas en [8.2.9] no cumplen uno de los requisitos mencionados en la introducción de este capítulo: sus derivadas primeras son discontinuas en los puntos x = +a/2. Estas discontinuidades, que tienen su origen en el salto infinito del potencial en los puntos mencionados, deben entenderse como una idealización de situaciones físicamente realizables. Sin embargo, representan una ambigüedad en el momento de la partícula, asociada a las paredes del pozo infinito y tienen consecuencias matemáticas como muestra el siguiente ejemplo.

Como dije antes, inicié mis indagaciones sobre el tema, a partir de mayo de 2012, llevando a cabo una búsqueda bibliográfica cuidadosa y con el asesoramiento de personas de mi entorno en mi universidad y en la Real Academia de Ciencias. Entre otras personas, me dirigí personalmente a Alberto Galindo (RAC y UCM), Antonio Fernández Rañada (UCM), Ramón Fernández Álvarez Estrada (UCM), J.M. Sánchez Ron (RAE, RAC y UAM), J. Santamaría (RAC y UCM) así como a muchos otros colegas de otras universidades, pero quien me resultó especialmente útil en mis indagaciones fue el que en ese tiempo era Presidente Honorifico de la Real Academia de Ciencias y Profesor Emérito de la UCM, Carlos Sánchez del Río y Sierra (Borja, Zaragoza; 16 de agosto de 1924, Madrid, 13 de mayo de 2013).

Figura 24. Carlos Sánchez del Río y Sierra (1924-2013). Cuadro en la Galería de Presidentes de la RAC.

Doctor en ciencias por la universidad de Madrid desde 1948, Carlos Sánchez del Río amplió sus estudios en la Universidad de Roma, el Centro Informazione Studi ed Esperienze (Milán), la Université de Genève, la Eidgenössische Technische Hoschschule (Zurich) y la Universidad de Chicago entre 1948 y 1953. Fue catedrático de Física Atómica y Nuclear en la Universidad de Madrid desde 1953 ocupando importantes cargos de gestión: Decano de la Facultad de Ciencias Físicas en1986 y Vicerrector años más tarde). Académico numerario de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales (1975), en 1975 fue elegido miembro del Consejo Asesor de RTVE. Fue también Director General de Política Científica, Presidente del Consejo Superior de Investigaciones Científicas, vicepresidente y presidente en funciones de la Comisión Asesora de Investigación Científica y Técnica, Director de Investigación de la Junta de Energía Nuclear. Presidente de la Real Sociedad Española de Física y Química, presidente de la Sociedad Nuclear Española, presidente de la Asociación Nacional de Físicos de España. En el ámbito internacional fue director de división del Organismo Internacional de Energía Atómica (Viena), presidente del Centro de Compilación de Datos Nucleares (París), Representante de España en la Sociedad Europea de Energía Atómica y en el Centro Europeo de Investigaciones Nucleares (CERN, Ginebra). Un listado de sus numerosos libros y artículos puede encontrarse en *Wikipedia*. De entre ellos, quisiera resaltar aquí el de *Los principios de la física en su evolución histórica* en el que lleva a cabo una exposición histórica muy meritoria, curiosamente con unos objetivos no muy lejanos a los que guiaron a los libros de Gamow antes mencionados pero ahora presentados de una naturaleza muy diferente.

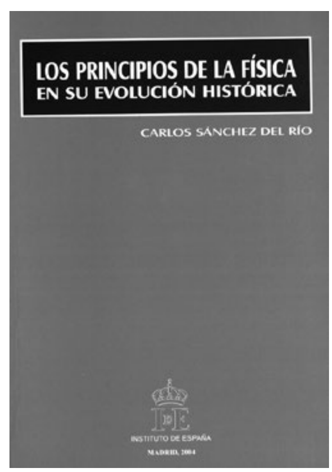


Figura 25. Los principios de la física en su evolución histórica de Carlos Sánchez del Río.

[25] Más tarde, en la página 233 los autores del Capítulo 8 envían a mi trabajo en *Interfaces and Free Boundaries* de 2015 antes citado.

En 2012, respondiendo a mis preguntas sobre los orígenes del tratamiento del potencial de paredes infinitas, Carlos Sánchez del Río, tras sugerirme la lectura del libro de W. Heitler[26] donde desgraciadamente no encontré lo que buscaba, me habló de la visita de Schrödinger a España invitado al Curso de Verano en Santander, de 1935, y me señaló que quizás podría ser una fuente importante de información para lo que yo pretendía, como efectivamente así fue. Pero esa visita de Schrödinger a España bien merece que la documentemos con más detalle en toda una sección de este trabajo.

4. SCHRÖDINGER (VISITAS A ESPAÑA DE 1934 Y 1935): DOS ESPAÑOLES RELEVANTES EN ESE ASUNTO CABRERA Y ZUBIRI

En las largas conversaciones que mantuve con Carlos Sánchez del Río, muchas de ellas telefónicas y otras aprovechando nuestra presencia en los Plenos de la Academia, me sugirió que leyese el librito de Erwin Schrödinger[27] de 1935 recogiendo las conferencias que impartió en Santander, en Agosto[28] de 1934, invitado por la Universidad Internacional de Verano.

Figuras 26 y 27. El libro de Schrödinger como primer número de la colección *Cursos de la U.I. de Verano de Santander,* editorial Signo, 1935, y foto, de Adriana Veyrat, de Schrödinger en esos años.

Schrödinger había recibido el premio Nobel de Física, junto con Paul Dirac y Werner Heisenberg, el año anterior y no cabe duda de que su visita de a España se presentaba como todo un excepcional acontecimiento para la época. En ese mismo año, Maurice Fréchet y Esteban Terradas participaron también como profesores de otros cursos[29]. El rector, en 1934, de esa recién creada Universidad Internacional de Verano era Blas Cabrera (1878-1945)[30], quien había sucedido en el cargo a Ramón Menéndez Pidal que había sido uno de sus fundadores en 1933. De la correspondencia personal entre Schrödinger y Cabrera se da buena cuenta[31] el libro de José Manuel Sánchez Ron, *Cincel, martillo y piedra*, Taurus, Madrid, 1999, al que enviamos al lector interesado.

Sin embargo, contra lo que uno pudiese imaginar inicialmente, es muy probable que el responsable directo de la invitación a Schrödinger no fuera el propio Cabrera sino el filósofo español Xavier Zubiri (1898-1983), quien había estudiado en Berlín durante el curso 1930-1931, donde frecuentó entre otros a Einstein, Schrödinger y Planck.

Figura 28. Xavier Zubiri (1898-1983).

[26] W. Heitler, Elementary Wave Mechanics, Oxford University Press, 1945.

[27] Erwin Schrödinger *La nueva mecánica ondulatoria* (traducción de X. Zubiri), Signo, Madrid, 1935.

[28] Ese mismo mes Schrödinger había participado como conferenciante en el Congreso de la AEPPC en Santiago de Compostela.

[29] Parece oportuno citar aquí el artículo de Julián Marías en el ABC, *Curso de verano de Santander de 1934*.

[30] Era también, además de Catedrático de la UCM, Presidente de la Academia de Ciencias de Madrid, cargo que ocupó hasta el año 1937 en que se exilió.

[31] Ver, por ejemplo, las tres cartas reseñadas en la página 315.

La labor de Zubiri en pro de la incipiente Universidad Internacional de Verano fue de gran valor, no sólo sugirió nombres acertados de grandes figuras de la ciencia y de las humanidades del momento, sino que además, como mantenía una buena amistad con muchos de ellos les animó a que aceptaran las invitaciones oficiales cursadas y a que vinieran a un país poco activo en la investigación científica como era el nuestro. Uno estaría tentado a documentar más las estrechas relaciones de amistad entre Zubiri y Schrödinger desde el viaje a Berlín del primero 1931, el excelente dominio del castellano por parte de Schrödinger, las publicaciones de Zubiri sobre la "Nueva Física", etc., pero nada mejor que enviar al lector a fuentes mucho más expertas en el tema[32].

Pero volvamos al libro de Schrödinger[33], se trata de una presentación de la mecánica ondulatoria de una manera divulgativa y literaria, sin fórmula alguna. No cita explícitamente a Gamow ni a Mott aunque si se refiere al potencial de paredes finitas e infinitas. Menciona que el espectro discreto para el potencial de paredes infinitas se convierte en un espectro continuo[34] si la "anchura del potencial" (es decir su soporte) crece de manera de cubrir toda la recta con lo que la partícula elemental pasa a ser una partícula de toda fuerza libre (partícula libre) si es que ese potencial es constante sobre su soporte. Un análisis minucioso de cada uno de los grandes apartados del librito fue llevado a cabo por Sanchez-Ron en su trabajo de 1992 antes mencionado. Como comentó él en aquella ocasión, dificilmente las lecciones impartidas por Schrödinger en Santander pudieron ser bien asimiladas por los profesores y estudiantes españoles allí presentes dado su escasa experiencia en el tema. Además, Schrödinger evitó referirse, de manera deliberada y explicitamente mencionada, a los temas más candentes en investigación en esa dirección.

Pese a la gran repercusión de la visita de Schrödinger en 1934, resulta curioso que apenas haya alusiones de un similar grado de detalle sobre el que fue su segundo viaje a España en 1935, ni tampoco sobre su relación con la Academia de Ciencias de nuestro país. Esta fue mi impresión tras preguntar a muchos los compañeros de la Academia de Ciencias y colegas de la UCM. Sin embargo, es de mencionar que sí se recoge con bastante detalle esa segunda visita en la meritoria tesis doctoral *La matemática de los quanta en España*, de Gonzalo Gimeno Valentín-Gamazo, leída en Mayo de 2015 en la Universidad Autónoma de Barcelona bajo la dirección de María Baig i Aleu. Al encontrar muchos puntos oscuros sobre este tema comencé mis indagaciones personales en Junio de 2016 acudiendo a los archivos de la Real Academia de Ciencias.

Empecé por consultar los libros de *Actas de Plenos de 1935* y todo lo que puede encontrar es que en el Pleno de marzo de 1935 se anunciaba una próxima conferencia de Schrödinger en la Academia, con fecha aún por determinar[35]. En el acta del Pleno siguiente, el 24 abril de 1935, no aparece absolutamente ninguna referencia a tal conferencia pese a que ahora sabemos con precisión que se celebró el 10 de abril. Más tarde, logré encontrar otros documentos que parecían no haber sido mencionados en los pocos textos donde se habla de su segunda visita a España. En particular, encontré detalles sobre la conferencia que impartió Schrödinger en la Academia de Ciencias[36] el 10 de abril de 1935 con el título de *El principio de indeterminación y su influencia sobre los conceptos de la Geometría del Mundo.*

32 Véase, por ejemplo, Carmen Castro, *Biografía de Xavier Zubiri*, Edinford, Málaga, 1992, el más reciente trabajo de Clara Janés, *El saber y el mar: Xavier Zubiri y Erwin Schrödinger* , EU-topias, 23-33, 2015 y el trabajo de J.M. Sánchez-Ron sobre Schrödinger y España (J.M. Sanchez-Ron, *A man of many worlds: Schrödinger and Spain*, en el libro *Erwin Schrodinger,* Bitbol (ed), O. Darrigol (ed), Éditions Frontiers, Paris, 1992, pág. 9-22.

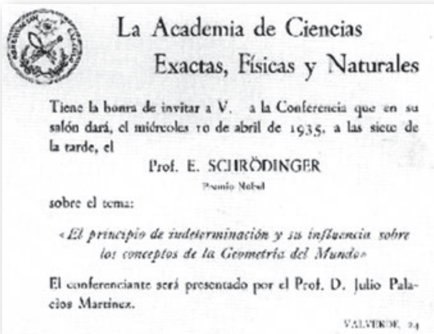
33 Que apareció publicado también en: *Schrödinger. La nueva mecánica ondulatoria y otros escritos*, editado por Juan Arana, en Clásicos del Pensamiento, Biblioteca Nueva, Madrid 2001.

34 Sin duda Schrödinger reproducía de manera abreviada el tratamiento matemático dado por von Neumann en su libro de 1932 *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, que luego sería traducido al castellano. La versión española se adelantó a las versiones inglesa y francesa. El libro fue traducido al castellano en 1949 con el título *Fundamentos matemáticos de la Mecánica Cuántica* y publicado por el Instituto de Matemáticas "Jorge Juan" del CSIC. La traducción se debió al Dr. R. Ortiz e incluía un prólogo de E. Terradas describiendo su impacto en la Universidad Central de Madrid. Se cuenta también con una reimpresión del CSIC que data de 1991.

35 Un anuncio previo a la conferencia apareció el 28 de marzo de 1935 en el ABC, como encontré en los archivos digitales de este diario.

36 Tras un decreto de 1938 (fruto de una reunión de los responsables de las seis academias españolas en Salamanca, el 6 de enero de ese año), con la proclamación de la República, la denominación de la Academia dejó de llevar su calificativo como Real.

En dicha cartulina[37] se informaba que la presentación correría a cargo de Julio Palacios[38], pero en otros documentos se reflejó que la presentación la llevó a cabo José Casares[39].


La Academia de Ciencias
Exactas, Físicas y Naturales

Tiene la honra de invitar a V. a la Conferencia que en su salón dará, el miércoles 10 de abril de 1935, a las siete de la tarde, el

Prof. E. SCHRÖDINGER
Premio Nobel

sobre el tema:

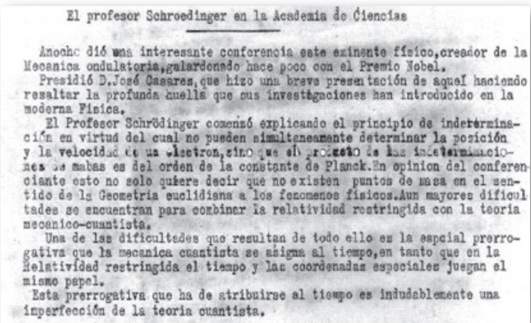
«El principio de indeterminación y su influencia sobre los conceptos de la Geometría del Mundo»

El conferenciante será presentado por el Prof. D. Julio Palacios Martinez.

VALVERDE, 24

Figura 29. Cartulina de invitación a la conferencia de Schrödinger.

La Academia elaboró un informe sobre la conferencia de ese Premio Nobel en la que se alude a la "imperfección" de la "mecánica cuantista" al arrogar una especial relevancia al tiempo, en contraste con la mecánica relativista en la que tiempo y coordenadas juegan el mismo papel.


El profesor Schroedinger en la Academia de Ciencias

Anoche dió una interesante conferencia este eminente físico, creador de la Mecanica ondulatoria, galardonado hace poco con el Premio Nobel.

Presidió D. José Casares, que hizo una breve presentación de aquel haciendo resaltar la profunda huella que sus investigaciones han introducido en la moderna Fisica.

El Profesor Schrödinger comenzó explicando el principio de indeterminación en virtud del cual no pueden simultaneamente determinar la posición y la velocidad de un electron, sino que el producto de las indeterminaciones de ambas es del orden de la constante de Planck. En opinion del conferenciante esto no solo quiere decir que no existen puntos de masa en el sentido de la Geometria euclidiana a los fenomenos fisicos. Aun mayores dificultades se encuentran para combinar la relatividad restringida con la teoria mecanico-cuantista.

Una de las dificultades que resultan de todo ello es la especial prerrogativa que la mecanica cuantista se asigna al tiempo, en tanto que en la Relatividad restringida el tiempo y las coordenadas especiales juegan el mismo papel.

Esta prerrogativa que ha de atribuirse al tiempo es indudablemente una imperfección de la teoria cuantista.

Figura 30. Informe sobre la conferencia de Schrödinger.

Más tarde, en el Anuario de la Academia de Ciencias de 1936, estallada la guerra, se hizo mención[40] a esta conferencia, que curiosamente se impartió en la Academia de manera simultánea (intercaladamente) a un ciclo de conferencias sobre la "Exploración científica del África Occidental Español" que fue objeto de grandes y pormenorizados elogios en el anuario. Sobre la conferencia del 10 de abril se puede leer:

> *De carácter enteramente distinto, aunque no menos interesante, fue la conferencia de 10 de abril que, intercalada en las del cursillo anterior, hubo de pronunciar en esta tribuna el ilustre Profesor y Premio Nobel, E. Schrödinger… Presidió el acto D. José Casares Gil, quien hizo una breve presentación del conferenciante, haciendo resaltar la profunda huella que sus investigaciones han introducido en la moderna Física.*

El anuario reproduce, a continuación, el informe al que me referido anteriormente, para concluir

> *Los aplausos con que el selecto público que escuchó al eminente profesor hubo de premiar la disertación de éste, son prueba evidente de la satisfacción con que hubieron de escucharle.*

Tampoco he visto mencionado en la literatura el hecho de que Schrödinger fue nombrado Académico Extranjero de la Academia de Ciencias. La propuesta de ese nombramiento partió de la Sección de Físicas el 27 de marzo de 1935, siendo aprobada en el Pleno del mes siguiente, el 24 de abril de 1935.

Al día siguiente le fue cursada la correspondiente *Carta de nombramiento* enviándole también los Estatutos de la Academia, a lo que Schrödinger contestó en un casi perfecto castellano[41] el 13 de mayo de 1935, acompañada de una foto[42] tal y como se le había demandado.

---

[37] La misma información que contenía esta cartulina fue lo que apareció en el anuncio de la conferencia el 10 de abril de 1935 en el ABC, como encontré en los archivos digitales de este diario.

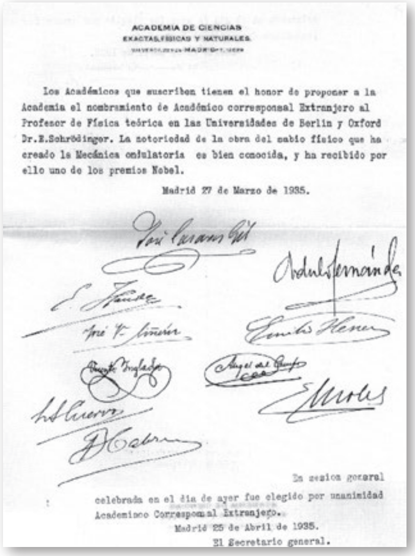
[38] Palacios no ocupaba ningún cargo en la Academia en esa fecha. Tomó posesión de su medalla como Académico en 1932. De hecho, sería más tarde Presidente de la Academia de 1966 a 1970 (habiendo sido Vicepresidente de 1958 a 1966).

[39] En 1935 aún no era Presidente de la Academia: lo sería de 1940 a 1958. El Presidente en 1935 era Blas Cabrera, que lo fue de 1934 a 1938.

[40] Como es habitual, la redacción del Anuario corre a cargo del Secretario de la Academia, que en 1936 era José María Torroja y Miret, con la supervisión del Presidente y del Vicepresidente (en ese año, Miguel Vegas y Puebla Collado).

[41] Es bien conocido el dominio de Schrödinger de numerosos idiomas. Comenzó a aprender castellano en 1934 (tal y como le comentó en una carta a Zubiri, preparando su primer viaje a España). De hecho, parece ser que cuando Zubiri tradujo del alemán el texto de sus conferencias en Santander, Schrödinger le corrigió varios acentos (véase el artículo de Clara Janés antes citado).

[42] Esa misma foto la debió hacer circular en otros entornos. Por ejemplo, aparece reproducida, al menos, en http://www.physicsoftheuniverse.com/scientists_schrodinger.html Por tanto, podemos afirmar que esa foto tan reproducida fue realizada antes del 13 de mayo de 1935.



ACADEMIA DE CIENCIAS
EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES

Los Académicos que suscriben tienen el honor de proponer a la Academia el nombramiento de Académico corresponsal Extranjero al Profesor de Física teórica en las Universidades de Berlin y Oxford Dr.E.Schrödinger. La notoriedad de la obra del sabio físico que ha creado la Mecánica ondulatoria es bien conocida, y ha recibido por ello uno de los premios Nobel.

Madrid 27 de Marzo de 1935.

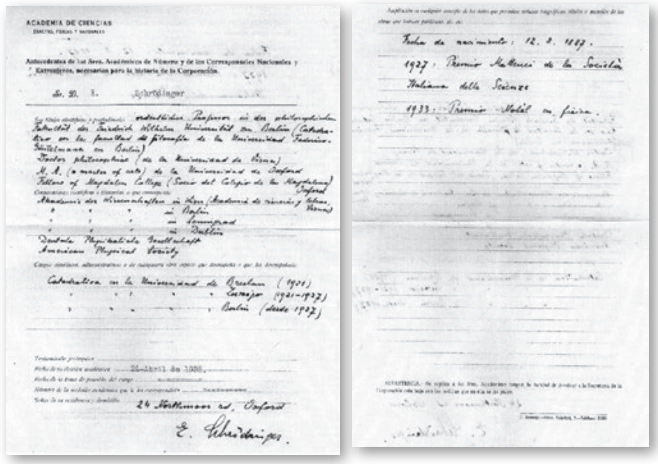
En sesion general celebrada en el dia de ayer fue elegido por unanimidad Academinco Corresponsal Extranjero.

Madrid 25 de Abril de 1935.

El Secretario general.

Figura 31. Propuesta aprobada en la Sesión Plenaria de la Academia, de 24 de abril de 1935, de nombramiento de Schrödinger como Académico Extranjero.

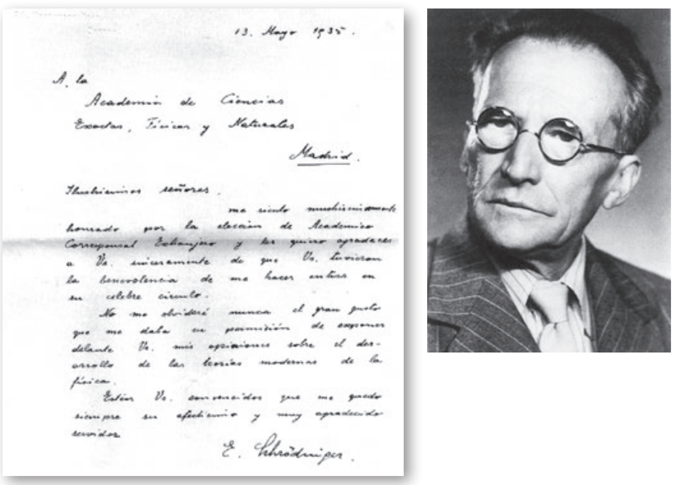
publicado años más tarde por Eduardo Gil Santiago[44] (*Nociones de la nueva mecánica cuántica*), en la revista *Metalurgia y Electricidad*, en tres entregas aparecidas en los números 47, 48 y 51, de 1941.



ACADEMIA DE CIENCIAS

Figura 33. Ficha como miembro extranjero cumplimentada por Schrödinger.

La carta la envío desde Oxford, donde se encontraba en 1935, junto a la ficha que se le había solicitado desde la Secretaría de la Academia.



13. Mayo 1935.

A la
Academia de Ciencias
Exactas, Físicas y Naturales
Madrid.

Ilustrísimos señores,

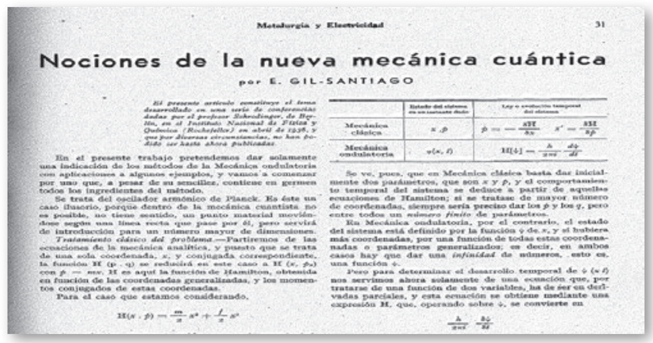
me siento muchísimamente honrado por la elección de Académico Correspondal Extranjero y les quiero agradecer a Vs. sinceramente de que Vs. tuvieron la benevolencia de me hacer entrar en su célebre círculo.

No me olvidaré nunca el gran gusto que me daba su permisión de exponer delante Vs. mis opiniones sobre el desarrollo de las teorías modernas de la física.

Estén Vs. convencidos que me quedo siempre su afectísimo y muy agradecido servidor

E. Schrödinger.

Figura 32. Carta y foto enviadas por Schrödinger.



Metalurgia y Electricidad 31

Nociones de la nueva mecánica cuántica

por E. GIL-SANTIAGO

El presente artículo constituye el tema desarrollado en una serie de conferencias dadas por el profesor Schrödinger, de Berlín, en el Instituto Nacional de Física y Química (Rockefeller) en abril de 1935, y que por diversas circunstancias, no han podido ser hasta ahora publicadas.

En el presente trabajo pretendemos dar solamente una indicación de los métodos de la Mecánica ondulatoria con aplicaciones a algunos ejemplos, y vamos a comenzar por uno que, a pesar de su sencillez, contiene en germen todos los ingredientes del método.

Se trata del oscilador armónico de Planck. Es éste un caso ilusorio, porque dentro de la mecánica cuantista no es posible, no tiene sentido, un punto material moviéndose según una línea recta que pase por él, pero servirá de introducción para un número mayor de dimensiones.

Tratamiento clásico del problema.—Partiremos de las ecuaciones de la mecánica analítica, y puesto que se trata de una sola coordenada, x, y conjugada correspondiente, la función H (p . q) se reducirá en este caso a H (x, p_x) con $p = mv$. H es aquí la función de Hamilton, obtenida en función de las coordenadas generalizadas, y los momentos conjugados de estas coordenadas.

Para el caso que estamos considerando,

$$H(x, p) = \frac{m}{2} x^2 + \frac{f}{2} x^2$$

	Estado del sistema en un instante dado	Ley o evolución temporal del sistema
Mecánica clásica	x, p	$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$ $\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}$
Mecánica ondulatoria	$\psi(x, t)$	$H[\psi] = -\frac{h}{2\pi i}\frac{d\psi}{dt}$

Se ve, pues, que en Mecánica clásica basta dar inicialmente dos parámetros, que son x y p, y el comportamiento temporal del sistema se deduce a partir de aquellas ecuaciones de Hamilton; si se tratase de mayor número de coordenadas, siempre sería preciso dar los p y los q, pero entre todos un *número finito* de parámetros.

En Mecánica ondulatoria, por el contrario, el estado del sistema está definido por la función ψ de x, y si hubiera más coordenadas, por una función de todas estas coordenadas o parámetros generalizados; es decir, en ambos casos hay que dar una *infinidad* de números, esto es, una función ψ.

Pero para determinar el desarrollo temporal de ψ (x t) nos servimos ahora solamente de una ecuación que, por tratarse de una función de dos variables, ha de ser en derivadas parciales, y esta ecuación se obtiene mediante una expresión H, que, operando sobre ψ, se convierte en

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Figura 34. Notas de las lecciones conferencias de Schrödinger publicadas por Eduardo Gil Santiago en 1941.

Muy poco se ha escrito sobre el hecho de que durante su segundo viaje a España Schrödinger impartió un curso de 3 sesiones en el Instituto Nacional de Física y Química (coloquialmente denominado *Rockefeller*) en Madrid en Abril de 1935. El contenido del curso[43] fue

A diferencia del texto que recogía sus conferencias de Santander, ahora si aparecen las fórmulas necesarias para su comprensión detallada. En el primero de los artículos se analiza el oscilador armónico de Plank y se lleva a cabo un pormenorizado análisis del problema espectral asociado, que se resuelve en términos de los polinomios de Hermite. Se menciona el texto de Courant-Hilbert en su versión alemana original *Metho-*

[43] El texto original de Schrödinger es accesible (ÖZP/SN, Österreichische Zentralbibliothek für Physik, Vorlesungen für Madrid).

[44] Físico nacido en 1903, becado en Berlín en 1934 (por lo que no pudo asistir a las conferencias de Schrödinger en Santander), fue ayudante de J. Palacios y más tarde “depurado” en 1939. Se estableció en Venezuela desde entonces, regresando definitivamente a España en 1955. Falleció en 1979. Según me informa A. Hernando, era suegro del distinguido físico y académico Francisco Ynduráin (1940-2008).

den der Mathematischen Physik[45] para concluir que la familia de autofunciones forma un sistema completo en el espacio de Hilbert L^2, análogamente a las series de Fourier. Termina el artículo con una muy pedagógica reflexión sobre las “Dificultades de la teoría y comparación con la clásica”, en donde se cita un trabajo de J. Palacios[46] sobre cómo cambia el átomo para pasar de un estado estacionario a otro. En el segundo aborda la no conmutatividad de los operadores diferenciales asociados a los momentos angulares y analiza su espectro. Menciona entonces la edición alemana de 1930 del libro de Dirac *The Principles of Quantum Mechanics*[47]. Aborda el problema de la “degeneración” a través de la posible multiplicidad de autofunciones para un mismo autovalor, aplicándolo al caso de un oscilador en dos dimensiones. En el tercer y último trabajo trata la cuantificación del momento angular logrando demostrar la equivalencia de la mecánica ondulatoria con la mecánica matricial propuesta por Heisenberg. Enviamos al lector, a este fin, al valioso trabajo de Gonzalo Gimeno Valentín-Gamazo antes mencionado para un estudio más pormenorizado de esas conferencias.

Una de las consecuencias más palpables del interés de las conferencias de 1935 fue la publicación[48], en 1937, del artículo *Un método para determinar los niveles de energía del oscilador armónico*, por el Ingeniero de Montes, Fernando Peña Serrano (1894-1960) en la *Revista Matemática Hispano-americana*[49]. *Se trata de lo que quizás fue la primera contribución original de un español, utilizando la ecuación de Schrödinger. Peña asistió a las tres citadas conferencias.*

5. LOS POTENCIALES SINGULARES Y UNAS REFLEXIONES FINALES: SOBRE EL CONCEPTO DE VERDAD EN CIENCIA

Pese a mis indagaciones sobre los textos iniciales sobre la ecuación de Schrödinger, y en particular, los textos que había dejado Schrödinger en España, la investigación sobre los antecedentes históricos del caso concreto del potencial de paredes finitas o infinitas me resultó muy ardua. Personalmente, llegué a la figura de Gamow[50] a través del libro de Louis de Broglie: *Ondas corpusculares y Mecánica Ondulatoria*, Espasa-Calpe, Madrid, 1947, que encontré en la Academia.

Figura 35. Libro de Louis de Broglie de1947.

Comencé observando, en su página 119, una figura que me era familiar: el pozo de potencial asociado al potencial al que está sometida una partícula α en función de su distancia al centro del núcleo. La parte interior corresponde al potencial intranuclear y la exterior al potencial de Coulomb que varía como 1/r.

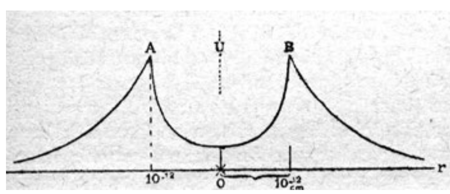


Figura 36. Pozo de potencial en el texto de Louis de Broglie.

[45] Este importante texto, que Schrödinger citaba con frecuencia, y que fue prohibido durante el régimen Nazi, tuvo varias ediciones en las que se incorporaron nuevos temas y revisiones: la original de 1924, 1930, el segundo volumen en 1938, 1943 y 1953. El libro fue prontamente conocido en España, J. Palacios ya lo menciona en su discurso de ingreso en la Academia en 1932.

[46] Comunicación en el Congreso de 1926 de la Asociación Española para el Progreso de las Ciencias celebrado en Coimbra.

[47] Años más tarde sería traducido al castellano. El libro más influyente de los primeros libros sobre mecánica cuántica fue sin duda *The Principles of Quantum Mechanics* de Dirac en 1930, el cual, a pesar de ser abstracto y en general poco pedagógico, tuvo un enorme éxito. Se imprimieron varias ediciones y traducciones y se convirtió en el trabajo de referencia sobre el tema desde su publicación.

[48] Llama la atención que fuera publicado durante la guerra.

[49] Volumen 12, páginas 10-16.

[50] La referencia al libro de Mott proponiendo por primera vez el potencial de paredes infinitas la hallé mucho después.

Tras comentar la ausencia de soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger, en su página 120 menciona

> *Existe, en ello, una gran dificultad y esta dificultad ha sugerido a Gamow la idea de aplicar la Mecánica Ondulatoria a la teoría de la "evasión" de las partículas* α*de un núcleo radiactivo. Se puede demostrar, en Mecánica Ondulatoria, que en el interior de una barrera de potencial, tal y como la representa la figura de la página anterior, …*

Pero la ambigüedad mencionada anteriormente para el caso del potencial de paredes infinitas me llevó a indagar si tal confinamiento podría ser rigurosamente probado si los potenciales eran adecuadamente singulares. En un primer trabajo consideré el caso unidimensional con un potencial de la forma

$$V_\infty(x\ :\ \Omega, V_o(\,\cdot\,)) = \begin{cases} V_o(x) & \text{if } x \in \Omega, \\ +\infty & \text{if } x \in \Omega, \end{cases}$$

donde Ω=(-R, R) y el potencial se hace singular en los bordes del intervalo como, por ejemplo,

$$V(x) = \frac{C}{d(x, \partial\Omega)^\alpha}$$

con α entre 0 y 2, y C una constante positiva. Mostré[51] que solo puede haber confinamiento, en el sentido de que la solución de la ecuación de Schrödinger para cualquier autovalor λ_n tiene su soporte en Ω, si y solo si α=2. Son los llamados *potenciales de Hardy*[52] de los que un caso particular, relevante en las aplicaciones, es el llamado potencial de Pösch–Teller [53]

para parámetros V_0 , k y α positivos. Lo que resulta paradójico es que el método de demostración que seguí es un poco insospechado en este contexto , pues tratándose de un problema lineal utilicé unos resultados previos elaborados en colaboración con Jesús Hernández[54] relativos a las soluciones nodales de unos problemas semilineales de tipo autovalor en los que se generaban unas ramas de bifurcación que emanaban desde el infinito de los espacios lineales de autovalores para el problema lineal sin perturbar.

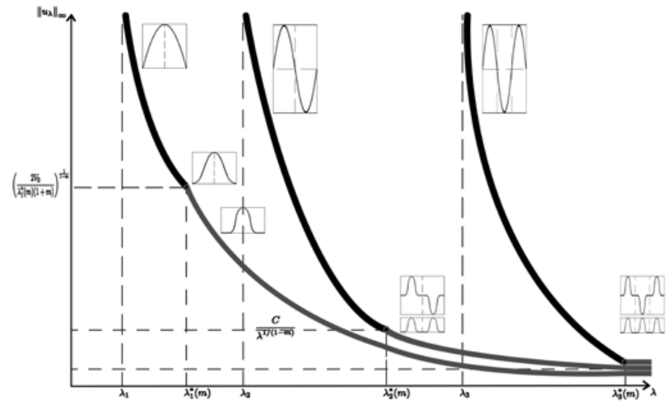


Figura 37. Diagrama de bifurcación de soluciones nodales para el problema semilineal.

Más tarde extendí ese resultado al caso en el que Ω es un abierto acotado del espacio n-dimensional y analicé también el caso del problema de evolución original de Schrödinger.[55]

$$i\frac{\partial\phi}{\partial t} + \Delta\phi = V(x)\phi$$

$$\phi(0,x) = \phi_0(x).$$

---

51 J.I. Díaz, On the ambiguous treatment of the Schrödinger equation for the infinite potential well and an alternative via flat solutions: the one-dimensional case. *Interfaces and Free Boundaries*, 17 (2015), 333–351.

52 En honor del famoso matemático de Oxford, G. H. Hardy (1877 –1947), quien estableció una muy útil desigualdad diferencial que está relacionada con esos potenciales.

53 G. Pöschl y E. Teller, Bemerkungen zur Quantenmechanik des Anharmonischen Oszillators. *Z. Phys*. 83 (3,4), 143–151 (1933).

54 J.I. Díaz, J. Hernández, Positive and nodal solutions bifurcating from the infinity for a semilinear equation: solutions with compact support, *Portugaliae Math*. 72, 2 (2015), 145-160.

55 J.I. Díaz, On the ambiguous treatment of the Schrödinger equation for the infinite potential well and an alternative via singular potentials: the multi-dimensional case. *SeMA-Journal* 74 3 (2017) 225-278.

Mostré que, a diferencia del caso en el que $0<\alpha<2$, para el caso de potenciales de Hardy, si la partícula está confinada en Ω (es decir si la probabilidad de encontrarla fuera de Ω es nula; lo que equivale a suponer que el soporte de $\Psi_0(x)$ es $\overline{\Omega}$) entonces la partícula se mantiene confinada, en todo instante posterior, en la misma región, es decir, en $\overline{\Omega}$).

De hecho, en este caso, el dominio Ω podría no ser conexo (presentando diversos "huecos") y el resultado muestra que la partícula no puede invadir esos huecos. Este es un tema relacionado con la propagación instantánea de los sistemas cuánticos[56]. El tratamiento del caso singular super-cuadrático[57], $\alpha>2$, requiere modificar adecuadamente el concepto de solución de la ecuación de Schrödinger y fue abordado separadamente en otro trabajo posterior [58].

Pero concluyamos ya, y lo haremos con unas reflexiones finales. Afortunadamente en ciencia, una pequeña ambigüedad como la referida para el caso del potencial de paredes infinitas, no merma un ápice lo más valioso de las aportaciones novedosas en la que aparece inmersa. A veces, la sutileza del pasaje hace que su repetición se perpetúe del investigador original a los libros de texto hasta que otra persona lo detecta.

La admiración por la labor original y "bien hecha en el tiempo en el que se produce", por tantísimas figuras tan excepcionales, debe guiar nuestro juicio global sobre las aportaciones científicas: silenciar que alguna pequeña ambigüedad, sin trascendencia, puede haberse escapado de su control puede llevarnos a pensar que esos sabios eran más máquinas que seres humanos. Como el propio Schrödinger escribió en su libro *¿Qué es la vida? El aspecto físico de la célula viva*[59]

"si un hombre nunca se contradice
será porque nunca dice nada",

frase que, de hecho, tomó de Unamuno al que conoció en Santander en su viaje de 1934.

Este texto concluye dando pie a unas reflexiones generales sobre la conexión entre estas pequeñas ambigüedades y el concepto de verdad en ciencia, asunto que ha ocupado a numerosos pensadores (entre ellos Karl Popper y René Thom). Me inclino por la tesis de éste último: *la verdad en ciencia tiene como fundamento lo aceptado por los científicos de la época en la que se produce la innovación*. Desarrollarlo más podría ser materia para otra futura conferencia.

---

[56] A. Galindo, Propagación instantánea en los sistemas cuánticos. *Anales de la Soc. Esp. Física y Química,* serie A Física. 64 (A), 141–147 (1968), G.C. Hegerfeldt y S.N.M. Ruijsenaars, Remarks on causality, localization, and spreading of wave packets. *Phys. Rev. D* 2.2(2), 377–384 (1980), G.C. Hegerfeldt, Instantaneous spreading and Einstein causality in quantum theory. Ann. Phys. 7, 716–725 (1998), P. Hauke y L. Tagliacozzo, Spread of correlations in long-range interacting quantum systems. Phys. Rev. Lett. 111(207202), 1–6 (2013).

[57] Como los propuestos en W.M. Frank y D.J., Land, Singular potentials. *Rev. Mod. Phys.* 43(1), 36–98 (1971), y en F. Cooper, A. Khare y U. Sukhatme, Supersymmetry and quantum mechanics. *Phys. Rep*. 267–385 (1975).

[58] J. I. Díaz, D. Gómez-Castro y J.M. Rakotoson. Existence and uniqueness of solutions of Schrödinger type stationary equations with very singular potentials without prescribing boundary conditions and some applications. Aceptado en *Differential Equations and Applications*, 2017. arXiv: 1710.06679 (véase también J.I. Díaz, D. Gómez-Castro, J. M. Rakotoson y R. Temam, Linear diffusion with singular absorption potential and/or unbounded convective flow: The weighted space approach". *Discrete and Continuous Dynamical Systems* 38.2 (2018), pp. 509–546. arXiv: 1710.07048).

[59] Orbis, Barcelona, 1986.