

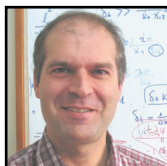
Einstein y la química

1. INTRODUCCION

El enorme impacto del trabajo de Albert Einstein (1879-1955) en la química pasa desapercibido para el gran público, e incluso para los científicos en general. La celebración en 2005 del año internacional de la física, que conmemora el "año milagroso" de Einstein, 1905, es una excelente oportunidad para que examinemos las influencias directas e indirectas de Einstein en la química y sus relaciones con esta ciencia con algún detenimiento. Estamos convencidos de que no han recibido la suficiente atención por parte de los historiadores y de que el asunto merece un estudio más detallado y riguroso del que presentamos en este breve artículo, en el que revisaremos informalmente y de forma no exhaustiva algunas de las conexiones entre Einstein y la química. Nadie pondría en duda que Einstein es un físico, incluso que es "el físico" por excelencia del siglo XX, mas precisamente por haber removido los cimientos de la física con una profundidad y extensión colosales, no debería extrañarnos que también la química, que al fin y al cabo se basa en hechos físicos como son la estabilidad y estructura atómica y molecular, o sus transformaciones ("reacciones") por colisión o interacción con campos externos, se haya beneficiado de su influjo. Basta observar que en un libro de química-física [Levine, 1995] la persona que más veces se menciona es precisamente Albert Einstein (Figura 1).

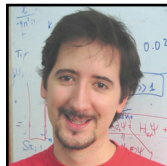


Figura 1. Fotografía de Albert Einstein (1879-1955) dedicada a Linus Pauling (Premio Nobel de Química en 1954 y de la Paz en 1962). Einstein y Pauling se conocieron en el "Comité de Emergencia de Científicos Atómicos" dedicado a promover el uso pacífico de la energía atómica. Pauling tomó a Einstein como modelo de acción moral.



Juan Gonzalo Muga

Departamento de Química-Física,
Facultad de Ciencia y Tecnología,
Universidad del País Vasco,
Apartado 644, 48080 Bilbao.
E-mail: qfpmufrj@lg.ehu.es



Adolfo del Campo

La contribución más popular y conocida de Einstein es su teoría de la "relatividad" (Figura 2), cuya importancia en la química es difícil de exagerar por varios motivos. El primero es que la relación entre el espín y la estadística de las partículas, y en particular el principio de exclusión de Pauli, que es un concepto central para explicar la estructura electrónica atómica y molecular, el sistema periódico, o el enlace químico, encuentran su justificación teórica en la teoría de la

relatividad especial [Pauli, 1940]. Además, los electrones en el átomo, en particular cerca del núcleo, se mueven a velocidades suficientemente elevadas como para que las "correcciones relativistas" lleguen a ser de importancia cuantitativa y cualitativa, y el acoplamiento espín-órbita también es de origen relativista. Propiedades tan evidentes y familiares como el color del oro, o el hecho de que el mercurio sea líquido, encuentran su explicación en estas "correcciones relativistas" que examinaremos en la sección 2 con más detenimiento.

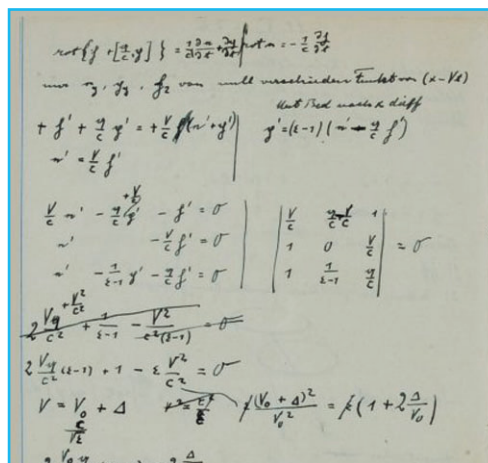


Figura 2. Notas de Einstein para un curso sobre relatividad especial que impartió entre 1918 y 1919 en las Universidades de Berlín y Zurich

En realidad las aportaciones de Einstein van mucho más allá de la relatividad. I. Rabi, en un artículo escrito en memoria de Einstein poco después de su muerte en 1955 [Bohr y Rabi, 1955], afirmaba que prácticamente cualquier idea fundamental importante en la física moderna se remonta, por lo menos en parte, a Einstein. Lo

sorprendente es que sus ideas no sólo no han dejado de ser importantes, cincuenta años después, sino que han cobrado aún mayor relevancia con el láser o la condensación de Bose-Einstein en gases diluidos. Contribuyó de manera decisiva al nacimiento de la mecánica cuántica y realizó las primeras aplicaciones de los conceptos cuánticos. Como es bien sabido, el Premio Nobel de Física de 1921 se le concedió oficialmente por su explicación y predicción de propiedades del efecto fotoeléctrico, aunque en la ceremonia de presentación, el Presidente del Comité Nobel de Física, Svante Arrhenius¹, resumió sus contribuciones en tres grandes campos originados en tres artículos publicados en 1905 [Einstein, 1905a, 1905b, 1905c]. Ya hemos mencionado la relatividad, que Arrhenius consideró polémica y a la que apenas dedicó unas pocas frases, restringiéndola, erróneamente como la historia ha demostrado, al dominio del debate filosófico y de sus implicaciones en astrofísica. Arrhenius luego mencionó explícitamente el fenomenal efecto que los artículos de Einstein ejercieron en dos campos de la química: el estudio del movimiento browniano en la química de coloides, y la interacción cuántica entre la materia y la radiación en la fotoquímica, que discutiremos en las secciones 3 y 5.

Einstein, como un rey Midas que "convierte en oro cuanto toca", realizó aportaciones fundamentales en un número asombroso de materias, cuyas consecuencias no han dejado de guiar o afectar el trabajo de físicos y químicos durante generaciones. El descubrimiento y desarrollo del láser en los años 60 es, sin duda, uno de los dos inventos estrella del siglo XX y una de las herramientas más importantes para analizar y manipular la estructura y dinámica moleculares, debe mucho al sencillo esquema fenomenológico que Einstein ideó para describir la interacción entre la radiación y la materia en 1917 [Einstein, 1917]. Gracias al láser se ha conseguido enfriar átomos y moléculas a temperaturas increíbles-

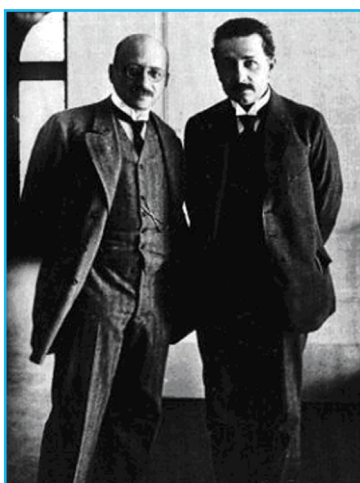


Figura 3. Fritz Haber (izquierda) y Albert Einstein. Haber pertenecía al grupo de científicos que llamaron a Einstein a Berlín en 1914, con quien trabó una cordial relación. Haber recibió el Premio Nobel de Química en 1918 por su descubrimiento del proceso de síntesis del amoníaco.

mente bajas e incluso la condensación de gases predicha por Einstein [Einstein, 1925] cuyas consecuencias en la química están aún por descubrir y desarrollar.

Einstein estableció muy pronto contacto en su carrera con problemas de interés para la naciente química-física, y se relacionó con algunos de los investigadores más importantes de este campo como Nernst, Debye, Haber, Stern, Ostwald, o Lindemann. Su primer artículo publicado trataba sobre la capilaridad y las fuerzas moleculares y estuvo influido al menos en parte por Ostwald, a quien solicitó trabajo en Leipzig sin éxito. Ostwald ocupaba la primera cátedra de química-física desde 1887 y recibió el Nobel de Química en 1909. Volveremos a encontrarnos con él en la sección sobre el movimiento browniano. En la **Figura 3** aparece Einstein junto con el químico alemán Fritz Haber.

2. EFECTOS RELATIVISTAS EN LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

Las características químicas de cualquier elemento químico son el reflejo directo de su estructura electrónica que a su vez depende de diversos efectos relativistas como ya hemos avanzado en la Introducción [Kellogg, 1997]. La velocidad de un electrón en un orbital atómico viene determinada por la energía total, la atracción de Coulomb y la fuerza centrífuga, de modo que aumenta con el número atómico Z y disminuye con el número cuántico principal n del orbital que ocupa. Adoptando una imagen simplificada del átomo a la *la* *Böhr*, la distancia más probable del electrón respecto al núcleo, r_n , es inversamente proporcional a la masa del mismo (m). En unidades atómicas, $r_n = n^2/mZ$, y la correspondiente velocidad resulta ser $v_n = Z/n$. La relatividad especial predice para velocidades próximas a las de la luz (c) un aumento de la masa, y como consecuencia supone una contracción del radio de Bohr, conocida como contracción relativista (ecuación 1)

$$(r_n)_{rel}/(r_n)_0 = (1-Z^2/n^2c^2)^{1/2} \quad (1)$$

Éste es un efecto directo o primario de la relatividad que afecta fundamentalmente a los electrones *core*, más veloces y próximos al núcleo. Los orbitales más afectados con mayor densidad en torno al núcleo y menor momento angular son, por tanto, los *s*, y en menor medida los *p*, que pasarán a ser más estables y difíciles de ionizar. En el caso del oro, por ejemplo, el electrón $6s^1$ tiene una masa de $1,22 m_e$ y una velocidad del 58% de c al tiempo que su tamaño se contrae un 20%. También podemos observar que dentro de los metales alcalinos existe una inflexión en la tendencia del grupo con respecto al radio atómico, que hace al francio ser más pequeño que el cesio a pesar de tener una capa adicional. De forma similar se produce una inversión en el grupo de los alcalinotérreos que afecta al radio, más pequeño que el bario.

¹ Arrhenius es uno de los padres fundadores de la química-física junto con Ostwald, van't Hoff y Nernst

La contracción relativista se pronuncia al descender a lo largo de un grupo en la tabla periódica, alcanzando su máximo en el sexto período y haciendo la configuración electrónica de tipo $6s^2$ especialmente estable: el denominado par inerte. En función de éste, se explica la existencia de compuestos como el AuH o el semiconductor no metálico CsAu con el Au(-I) a guisa de haluro, en los que además cabe destacar una reducción de la longitud de enlace. Por la misma razón sucede que los compuestos más frecuentes del talio, plomo y bismuto ($[Xe]4f^{14}5d^{10}6s^26p^n$ con $n = 1, 2, 3$; respectivamente) corresponden a los estados de oxidación Tl(I), Pb(II) y Bi(III), en contraste con los elementos más ligeros del mismo grupo. De forma aún más llamativa el mercurio metal, interacciona débilmente careciendo de afinidad incluso por sí mismo, debido a la dificultad de remover o promocionar un electrón del orbital $6s^2$. Esto explica su estado líquido.

Dado que los efectos primarios relativistas afectan a los orbitales más internos se ha considerado durante largo tiempo que su trascendencia en química era escasa. Sin embargo, estudios recientes han demostrado la gran relevancia de los efectos relativistas para elementos de número atómico medio y moderado, que se manifiestan en su espectro y en los de sus compuestos, en las constantes espectroscópicas, o en la reactividad. Para entender esta aparente paradoja, ha de considerarse que la contracción relativista, conlleva un apantallamiento más efectivo del núcleo por los electrones *core*, que junto con las relaciones de ortogonalidad, resulta en una expansión de los orbitales de valencia y disminución de los potenciales de ionización. Estos efectos secundarios son especialmente notorios en los orbitales *d* y *f* de mayor momento angular, y su combinación con los efectos relativistas directos aumenta el salto energético entre los orbitales internos y los de valencia, permitiendo excitaciones electrónicas en el visible como las que dan al oro su particular color.

La química cuántica relativista se encuentra en un período de desarrollo en el que nuevos algoritmos menos exigentes computacionalmente están permitiendo incluir en cálculos rutinarios los efectos que hemos descrito brevemente. El gran abanico de métodos computacionales con correcciones relativistas hace posible hoy en día interpretar mejor los espectros atómicos y moleculares. Por ejemplo, en el estudio mediante espectroscopia láser de los excímeros formados entre metales alcalinos y mercurio, se ha demostrado la importancia de las correcciones relativistas, que afectan a la luz emitida por una lámpara de vapor de mercurio.

La combinación de la teoría relativista de 1905 con la mecánica cuántica conlleva además, para un electrón, la sustitución de la ecuación de Schrödinger por la de Dirac y la introducción de una función de onda de cuatro componentes. Como resultado, aparece de forma natural el espín del electrón, introducido *ad hoc* por

Pauli, lo que explica el radio giromagnético y el momento magnético de esta partícula. Este último, al interactuar con el momento angular orbital da lugar al acoplamiento espín-órbita, responsable del efecto Zeeman anómalo, la estructura fina de los espectros, así como del fundamento de la resonancia de espín electrónico (RSE), que permite el estudio de especies químicas con espines desapareados². Incluso la estructura hiperfina es una consecuencia de la interacción del momento magnético electrónico, en este caso con el espín nuclear. De la ecuación de Dirac se desprende también el descubrimiento de la antimateria, en particular del positrón, cuya existencia fue verificada experimentalmente por Anderson. Al ser la más común de las antipartículas, ha resultado ser una sonda de especial utilidad para estudiar algunos compuestos químicos, y se ha aplicado en la industria para caracterizar metales, semiconductores, o polímeros. Quizás la técnica más espectacular basada en el uso de esta antipartícula es la tomografía por emisión de positrones (PET), en la que se detectan los fotones resultantes de la aniquilación de los positrones producidos durante el decaimiento radioactivo de una biomolécula marcada, lo que permite visualizar la distribución de la misma en los órganos corporales. Así se estudia, por ejemplo, el metabolismo de la glucosa en el cerebro.

3. MOVIMIENTO BROWNIANO

En la primera década del siglo XX el movimiento browniano atrajo la atención de muchos investigadores. En 1905, Einstein fundó una "teoría cinética" para este movimiento que le permitió deducir las principales propiedades de las "suspensiones", es decir, líquidos con partículas sólidas suspendidas. Esta teoría, basada en la mecánica clásica, ayuda a explicar el comportamiento de las soluciones coloidales dentro del contexto de lo que se ha convertido en una importante rama de la ciencia, la química de los coloides³. La ecuación de Einstein-Smoluchowski, en particular, describe la dispersión promedio de las partículas coloidales en función del tiempo y del coeficiente de difusión. Por otro lado, la dependencia de este coeficiente con la temperatura, viscosidad y radio molecular viene dada por la ecuación de Stokes-Einstein.

A finales del siglo XIX y principios del XX, muchos físicos y químicos positivistas pretendían desbancar a la mecánica de su papel central en la ciencia por estar "plagada de hipótesis inverificables". Además, la segunda ley de la termodinámica parecía un obstáculo insalvable para el mecanicismo. Ernst Mach y otros "fenomenistas" negaban la existencia de los átomos materiales. También lo hacían los energetistas, liderados por Wilhelm Ostwald, quienes mantenían que la energía y las leyes de la termodinámica constituían las únicas bases sólidas para entender los procesos físicos. Sin embargo, un grupo más reducido liderado por Boltzmann⁴, a quien el joven Einstein admiraba, se

² La espectroscopía RSE se basa en las desviaciones del valor del radio giromagnético, debidas al acoplamiento espín-órbita y a la interacción del momento angular orbital con el campo magnético local.

mantuvo fiel a la idea atómica y a la utilidad científica de las hipótesis e imágenes, aunque no fueran inmediatamente observables. Boltzmann proporcionó una interpretación mecánico-estadística del segundo principio y también lo hizo el físico americano Gibbs. Einstein escribió tres artículos entre los años 1902 a 1904 en los que derivó de forma independiente la segunda ley de la termodinámica a partir de argumentos atomísticos y mecano-estadísticos. En su Tesis doctoral, que presentó en la Universidad de Zurich en 1905 con el título: *Sobre una nueva determinación de las dimensiones moleculares*, desarrolló una teoría molecular estadística de los líquidos, y en un artículo separado encontró la explicación microscópica molecular del movimiento browniano, que había constituido un reto, desde que el botánico Robert Brown lo observara en 1828. Einstein predijo que el movimiento aleatorio de las moléculas en un líquido al impactar con partículas suspendidas más grandes resultaría en un movimiento irregular observable de estas partículas, a partir del cual determinó las dimensiones de las hipotéticas moléculas. Hacia 1908 ya pocos dudaban de la existencia de átomos y moléculas a partir de la evidencia generada por el estudio del movimiento browniano. Hoy, la microscopía túnel de barrido proporciona impresionantes imágenes de átomos o moléculas individuales, que podemos incluso llegar a cambiar de lugar a voluntad.

Una consecuencia del análisis de Einstein es que la densidad de partículas en función de la altura en una suspensión diluida en el equilibrio de sedimentación viene dada por una ecuación que depende de la masa flotante de la partícula, la aceleración de la gravedad, la constante de Boltzmann, y la temperatura absoluta. Esta ecuación expresa también la distribución de moléculas de gas sometidas a la gravedad en una atmósfera a temperatura constante, y en este contexto es conocida como la "distribución barométrica". Es decir, los coloides, para algunos propósitos, se comportan como átomos grandes. La comprobación experimental debida a Perrin (1870-1942) de la "distribución

barométrica coloidal" contribuyó a su Premio Nobel de Física en 1926 y a la aceptación generalizada de la realidad de las moléculas. La química de coloides se desarrolló con rapidez y recibió también los honores de la Academia sueca. El Premio Nobel de Química de 1925 se otorgó a Zsigmondy por estudiar los coloides mediante un microscopio especialmente diseñado y comprobar la naturaleza inhomogénea de las soluciones coloidales⁵, mientras que el Premio Nobel de Química de 1926 se concedió a Theodor Svedberg por el desarrollo de la ultracentrífuga y su trabajo sobre coloides que contribuyó, junto con el de Perrin, a comprobar la teoría de Einstein del movimiento browniano y a justificar la existencia de las moléculas.

4. CALORES ESPECÍFICOS

Einstein fue el primero en aplicar la física cuántica a la mecánica estadística de un sistema material con su tratamiento del calor específico de los sólidos en 1907, asunto que atrajo también la atención de ilustres químico-físicos como Walther Nernst⁶, Otto Stern⁷ y Peter Debye⁸. El primero, a raíz de sus investigaciones en termoquímica, había formulado en 1906 la tercera ley de la termodinámica según la cual el calor específico debía tender a cero en el cero absoluto de temperatura. Einstein explicó este hecho con un sencillo modelo cuántico en el que consideraba una única frecuencia de oscilación para los modos del cristal. Nernst efectuó además mediciones precisas entre 1905 y 1910, y ambos presentaron ponencias sobre el calor específico a bajas temperaturas en el Congreso Solvay de 1911⁹ (Figura 4). Posteriormente, Nernst y Planck convencieron a Einstein para trasladarse desde Zurich a Berlín en 1914. El modelo de Einstein fue complicado sucesivamente por Nernst y Lindemann, con dos frecuencias, y luego por Debye, quien incorporó una distribución continua de frecuencias.

En cuanto a los gases, la teoría cinética clásica de Boltzmann predecía calores específicos distintos para

³ A mediados del siglo XIX el científico inglés Graham clasificó las sustancias como cristaloides y coloides. Un cristaloides, por ejemplo la sal común, se caracteriza en que pasa en el estado disuelto fácilmente a través de las membranas tales como películas del papel, y exhibe una difusión libre rápida. Un coloide, por otra parte, por ejemplo el pegamento, no puede pasar a través de tales membranas y se difunde muy lentamente. La palabra coloide tiene su origen en la palabra griega para el pegamento, kolla. Otros ejemplos de coloides comunes son las proteínas, el almidón, o el caucho.

⁴ Un interesante resumen de estos debates, y escritos originales de Boltzmann pueden encontrarse en [Boltzmann, 1986].

⁵ Muy pronto se descubrió que la misma sustancia puede presentarse como cristaloides o como coloide. Por ejemplo, el oro con el mercurio produce una solución cristaloidal, mientras que el oro en una solución acuosa existe solamente en el estado coloidal. Es por lo tanto más correcto distinguir estados cristaloidales y coloidales en vez de sustancias cristaloidales y coloidales. Para entender la razón de estos diversos estados, algunos investigadores recurrieron al concepto de alotropía que se ilustraba con el ejemplo típico del fósforo y dos de sus variedades alotrópicas, amarilla y roja. Otros pensaban que la diferencia consistía en que las soluciones coloidales no eran uniformes y homogéneas como las cristaloidales, sino que contenían partículas de un tamaño que excedía muchas veces el de las moléculas en una solución cristaloidal. Este problema fue resuelto por la invención del ultramicroscopio de Zsigmondy a principio del siglo XX.

⁶ Premio Nobel de Química de 1920, ayudante de Ostwald en Leipzig, fundó en 1895 el primer Instituto dedicado íntegramente a la química-física en Gotinga, Alemania.

⁷ Otto Stern se doctoró en química-física en 1912, fue precursor de los haces moleculares y responsable junto a Gerlach del experimento en el que un haz atómico se separa en dos al ser sometido a un campo magnético. Obtuvo el Nobel de Física en 1943.

⁸ Premio Nobel de Química en 1936.

⁹ El primer Congreso Solvay fue concebido y organizado en 1911 por Nernst que convenció al químico belga Ernest Solvay para financiárselo. Solvay se había hecho rico mediante un procedimiento para fabricar bicarbonato sódico. Al primer congreso asistieron veintiún físicos, entre los que se encontraban químico-físicos como el propio Nernst, Lindemann y Goldschmidt; otros participantes que realizaron importantes aportaciones a la química fueron E. Warburg (que trabajó en fotoquímica) y M. Curie (Premio Nobel de Química en 1911 y de Física en 1903), además del propio Einstein.



Figura 4. Los veintiún participantes del primer Congreso Solvay de 1911.

gases monoatómicos ($3R/2$), o formados por moléculas diatómicas ($5R/2$) o poliatómicas ($3R$), debido a los diferentes grados de libertad de rotación. La predicción estaba de acuerdo con el experimento a temperaturas ordinarias pero no a temperaturas muy bajas, en las que todos los gases se comportaban como monoatómicos, lo que puede entenderse si se supone que los grados de libertad rotacionales se bloquean. Nernst había señalado en 1911 que esto podría deberse a efectos cuánticos pero no investigó el problema teóricamente, que es lo que hicieron Einstein y Stern por primera vez en 1913 [Einstein y Stern, 1913] con un modelo algo imperfecto, ya que en aquella época no estaba claro cómo aplicar la teoría cuántica a los cuerpos rotantes (incluyeron una energía de rotación de punto cero a semejanza de la vibración). A temperaturas aún más bajas uno espera, de acuerdo con el tercer principio de la termodinámica, que incluso los grados de libertad traslacionales se "congelan" y el calor específico se anule, pero entonces no existía una teoría adecuada para explicarlo. Habría que esperar unos años, hasta el descubrimiento de la estadística de Bose-Einstein, de la que hablaremos más adelante, para poder resolver esta cuestión.

5. EL EFECTO FOTOELÉCTRICO Y LA INTERACCIÓN RADIACIÓN MATERIA

La analogía entre las entropías de la radiación en el régimen de Wien ($h\nu \gg kT$, donde h es la constante de Planck, ν la frecuencia, k la constante de Boltzman y T la temperatura absoluta) y la entropía de un gas ideal llevaron a Einstein a proponer que la radiación no era continua sino cuantizada [Einstein, 1905a]. Esto suponía ir más allá que Planck para quien la radiación venía descrita por ondas electromagnéticas continuas, y sólo su intercambio con la materia estaría cuantizado al ser emitida o absorbida. Mediante esta idea, sencilla pero revolucionaria, con la que comienza la paradójica dualidad onda-partícula, Einstein pudo explicar y predecir las características del efecto fotoeléctrico y sentó las bases de la fotoquímica, que estudia las reacciones químicas activadas por la absorción de luz. En general, el número de fotones absorbidos es igual al número de moléculas que experimentan una transición a un estado

electrónico excitado, lo que se conoce como ley de Stark-Einstein de la fotoquímica [Einstein, 1912]. Una influencia más indirecta pero no menos importante de Einstein en la fotoquímica y en la espectroscopía es debida a su contribución crucial en la teoría que dio lugar al desarrollo del láser.

En 1917, cerca de nueve años antes del desarrollo de la pertinente teoría cuántica, Einstein, en un extraordinario artículo [Einstein, 1917] que se considera el fundamento teórico del láser, postuló un modelo sencillo de interacción radiación materia en el que, además de los procesos de absorción y emisión espontánea, interviene un tercer proceso: la emisión estimulada. La emisión estimulada es además idéntica a la radiación incidente y mantiene la dirección y coherencia, que es lo que facilita la acción láser. Los tres procesos venían caracterizados por probabilidades de transición por unidad de tiempo conocidos hoy en día como coeficientes A y B de Einstein. La distribución de Planck y los coeficientes se obtenían suponiendo la distribución de Boltzmann para las moléculas. Este artículo se considera el primero en el que se introducen factores estadísticos en fenómenos atómicos [D'Abro, 1951], e influyó en la formulación matricial de Heisenberg [Bohr y Rabi, 1955]. También se discute en él, por primera vez, el momento del cuanto de radiación y su conservación en los procesos de emisión y absorción, lo que constituye uno de los mecanismos básicos de las técnicas recientes de enfriamiento atómico por láser.

Aunque los coeficientes A y B son aplicables en muchas situaciones, fueron especialmente importantes en el período en el que se desarrollaban los láseres a finales de los 50 y principios de los 60. La naturaleza de los coeficientes es tal que no se puede utilizar la radiación en una cavidad para elevar electrones preferentemente a un estado superior, produciendo la inversión de población necesaria para la acción del láser. La proporción particular entre los coeficientes sugiere que, en presencia de la luz, "bombear" electrones a estados superiores tendría la misma probabilidad que estimular a un electrón ya excitado para realizar la transición en sentido inverso. Así, el láser no se puede lograr con un sistema de dos niveles, sino con sistemas de tres niveles como en el láser de helio-neón donde la inversión de población del nivel superior se consigue mediante transferencia no radiativa desde el gas helio a los átomos de neón.

Gracias a la coherencia, monocromaticidad e intensidad de la luz láser, la espectroscopía sufrió un cambio cualitativo importantísimo. Mediante láseres se inducen reacciones fotoquímicas, se identifican y analizan compuestos, y se estudia el movimiento de los átomos durante la reacción química. A. Zewail ganó el Premio Nobel de Química en 1999 por sus estudios del estado de transición de las reacciones químicas mediante la espectroscopía de femtosegundos.

6. ÁTOMOS Y MOLÉCULAS ULTRAFRÍOS: CONDENSADOS DE BOSE-EINSTEIN

En 1924 el físico indio S. Bose pidió a Einstein que le ayudara a publicar un artículo. En él postulaba una nueva estadística para los fotones con el objeto de deducir la ley de distribución de equilibrio de Planck, que no podía obtenerse aplicando a los fotones la estadística de Boltzmann. La novedad consistía en que se negaba toda individualidad a los fotones, de tal manera que los estados microscópicos caracterizados por intercambios de fotones se consideraban idénticos. Einstein no sólo ayudó a Bose a publicar su artículo [Bose, 1924], sino que aplicó esta nueva estadística a un gas atómico y predijo una transición de fase a temperaturas muy bajas en la que los átomos estarían en el mismo estado fundamental, conocido hoy en día como condensado de Bose-Einstein o por su acrónimo inglés BEC, cuando la longitud de onda del movimiento fuera comparable a la distancia media entre átomos [Einstein, 1925]. Ésta fue la primera aplicación de la idea de de Broglie de asignar un carácter ondulatorio a la materia, y de hecho Schrödinger supo de la hipótesis de de Broglie gracias al artículo de Einstein. Al principio se creyó que la transición sería difícil o imposible de observar porque a esas temperaturas las interacciones llevarían antes a la licuefacción o solidificación, y la idea permaneció dormida hasta 1938, cuando London la utilizó para explicar la superfluidez del ^4He líquido. Sin embargo, las interacciones del helio son muy fuertes lo cual reduce la ocupación del estado fundamental y dificulta las medidas. Los condensados de Bose-Einstein para gases diluidos (**Figura 5**), con una fracción mayor de átomos en el condensado y más cercanos a la idea original de Einstein, se consiguieron en 1995 para varios átomos alcalinos [Anglin y Ketterle, 2002]. Los condensados proporcionan una oportunidad magnífica de explorar efectos cuánticos controlables mediante láseres y campos magnéticos a escala macroscópica, a temperaturas del orden de 10^{-5} K y densidades entre 10^{13} - 10^{15} átomos por cm^3 gracias a nuevas técnicas de atrapamiento y enfriamiento por láser o magneto-ópticas. Posteriormente, se han conseguido condensar

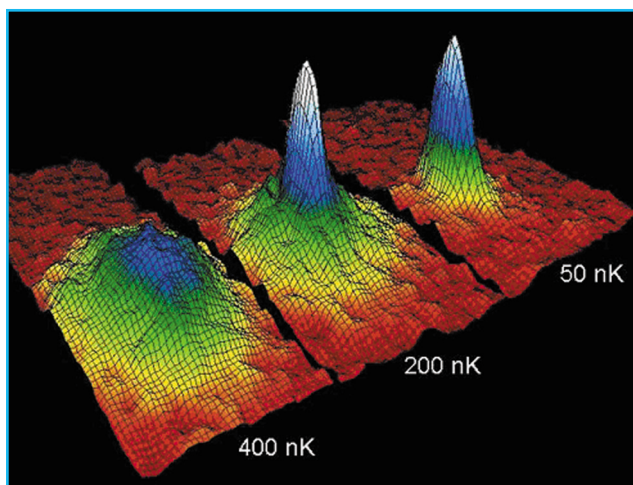


Figura 5. Imagen de un condensado de Bose-Einstein

alcalino térreos y gases nobles metaestables.

Al menos parte del proceso de enfriamiento por láser usa la transferencia de momento entre fotones y átomos con dos niveles efectivos, que pueden repetidamente absorber y emitir luz de una frecuencia en resonancia seleccionada. No es posible enfriar las moléculas directamente mediante láser con la misma facilidad que los átomos, debido a que se pueblan muchos niveles vibracionales y rotacionales en vez de dos niveles. Sin embargo, ha sido posible producir dímeros traslacionalmente ultrafríos de metales alcalinos mediante fotoasociación de dos átomos fríos, que es el proceso por el que dos átomos absorben colectivamente un fotón para formar una molécula ligada en un estado excitado. Esta espectroscopía es complementaria a la habitual puesto que proporciona información sobre estados ligados cerca del límite de disociación en la curva de energía potencial del estado excitado molecular. Otro método de producir moléculas frías consiste en usar un baño de átomos fríos, lo que tiene la ventaja de poderse aplicar a distintos tipos de moléculas.

Las temperaturas ultrafrías suponen para la química-física teórica y experimental un gran reto ya que los potenciales de interacción deben conocerse con una precisión mucho mayor que a temperaturas ordinarias, en particular en la región de van der Waals. Por ello ha sido necesario desarrollar nuevas espectroscopías y técnicas de cálculo, pero hay mucho que ganar puesto que las interacciones pueden llegar a modificarse mediante campos externos alterando así la química. Además, el intervalo de energías que participan es tan estrecho que una resonancia puede influir en todo el gas y no solamente en una pequeña fracción de átomos. Finalmente, al comprimirse el espacio de fases, las colisiones se convierten en fenómenos coherentes que pueden servir para crear estados específicos. En 2002, se consiguió formar un condensado de moléculas formadas por átomos de rubidio, mientras que en el 2003 se han formado condensados con pares (bosónicos) de átomos fermiónicos de litio y potasio.

La química de las temperaturas ultrafrías acaba de comenzar. La nanofabricación, o la creación de moléculas de diseño son algunos de los objetivos que pueden vislumbrarse, pero puede haber muchas aplicaciones que ahora desconocemos. Sería de particular interés la producción de condensados moleculares a partir de átomos fríos en estados específicos vibro-rotacionales, lo que puede conseguirse mediante dos láseres de colores ligeramente diferentes, el primero bombea a un estado excitado, mientras que el segundo induce la transición a un estado excitado del estado electrónico fundamental [Burnet y otros, 2002]. La alargada sombra de Einstein se proyecta desde múltiples ángulos: el concepto moderno de átomo, así como su estructura y propiedades, el concepto de fotón, la interacción entre radiación y materia, la estadística que los gobierna, el fenómeno de la condensación, y el láser son elementos de esta prometedora investigación que llevan grabada su marca.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a Pascual Román por haber sugerido el tema de este trabajo, así como la financiación del

Ministerio de Ciencia y Tecnología-FEDER" (BFM2003-01003), UPV-EHU (00039.310-13507/2001), y Gobierno Vasco (BF104.479).

REFERENCIAS

1. Anglin, J. R.; Ketterle, W. *Nature* **2002**, *416*, 211.
2. Bohr, N.; Rabi, I. I. *Scientific American* **1955**, *192*, 31.
3. Boltzmann, L. *Escritos de mecánica y termodinámica*, Alianza Editorial: Madrid, 1986.
4. Bose, S. N. Z. *Phys.* **1924**, *26*, 178.
5. Burnet, K.; Julienne, P. S.; Lett, P. D.; Tiesinga, E.; Williams, C. J. *Nature* **2002**, *416*, 225.
6. D'Abro, A. *The rise of new physics*, Dover: Nueva York, 1951.
7. Einstein, A. *Ann. Physik* **1905a**, *17*, 132.
8. Einstein, A. *Ann. Physik* **1905b**, *17*, 549.
9. Einstein, A. *Ann. Physik* **1905c**, *17*, 891.
10. Einstein, A. *Ann. Physik* **1912**, *37*, 832.
11. Einstein, A. *Physika Zeitschrift* **1917**, *18*, 121.
12. Einstein, A. *Sitzungsberichte, Preussische Akademie der Wissenschaften* **1925**, *1*, 3.
13. Einstein, A.; Stern, O. *Ann. Physik* **1913**, *40*, 551.
14. Kellogg, C. B. *An Introduction to Relativistic Electronic Structure Theory in Quantum Chemistry*, University of Georgia, Athens, EE UU, 1997, <http://zopyros.ccqc.uga.edu/~kellogg/docs/rltv/node1.html>
15. Levine I. N. *Fisicoquímica*, MacGraw-Hill: Madrid, 1995, vol 2.
16. Pauli, W. *Phys. Rev.* 1940, *58*, 716. La frase final del artículo dice: "In conclusion we wish to state, that according to our opinion the connection between spin and statistics is one of the most important applications of the special relativity theory".

Congresos

MINISTERIO DE EDUCACIÓN Y CIENCIA
Instituto Superior de Formación del Profesorado

Universidad Politécnica de Madrid
E.T.S. de Ingenieros Industriales

Jornada sobre *Didáctica de la Física y la Química* en los distintos niveles educativos

Reales Sociedades Españolas de Física y de Química

ice
UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID
Instituto de Ciencias de la Educación

Madrid, 6 de Julio de 2005

INFORMACIÓN
Jornada sobre *Didáctica de la Física y la Química* en los distintos niveles educativos
E.T.S. de Ingenieros Industriales (U.P.M.)
José Gutiérrez Abascal, 2. 28006 Madrid
91 336 30 37 / 8
<http://www.etsii.upm.es/ieducativa/Jornadas.htm>

ENSEÑANZA DE LAS CIENCIAS
Revista de investigación y experiencias didácticas

VII Congreso Internacional sobre Investigación en la Didáctica de las Ciencias

Educación científica para la ciudadanía

Granada, 7 al 10 de septiembre de 2005

Universitat Autònoma de Barcelona
Institut de Ciències de l'Educació

Universidad de Granada
Departamento de Didáctica de las Ciencias Experimentales

UNIVERSITAT DE VALÈNCIA
Vicerectorat d'Investigació

Os invitamos a consultar la página web del Congreso, en donde se irá concretando y desarrollando el programa:
blues.uab.es/rev-ens-ciencias/congreso