

SOBRE EL PRINCIPIO ADIABÁTICO DE EHRENFEST

Luis Navarro Veguillas

Departament de Física Fonamental. Universitat de Barcelona

Palabras clave: *Adiabático, invariante, principio, cuantización, periódico, multiperíodico, Wien, Planck, Sommerfeld, Ehrenfest*

On the Ehrenfest's Adiabatic Principle

Abstract: In this paper we analyse part of the outstanding role played by the Ehrenfest's adiabatic principle in the development of early quantum concepts. We specifically stress the attention it deserves as the first successful attempt to achieve a sole justification for the several "quantum conditions" existing in the old quantum theory.

Key words: adiabatic, invariant, principle, quantization, periodic, multiperiodic, Wien, Planck, Sommerfeld, Ehrenfest.

Introducción: física clásica y física cuántica

Nunca logró la física cuántica sustituir por completo a la física clásica. Ni siquiera hoy, pues sabido es que la cuantización de todo sistema físico requiere su previa descripción al estilo clásico; además, la teoría de la medida habrá de conciliar el carácter cuántico del objeto microscópico con el típicamente clásico del aparato de medida y de las mismas observaciones experimentales. Por ello, el que la teoría cuántica llegue a reemplazar a la clásica, liberándose de toda influencia de ésta, no parece empresa viable; al menos por ahora.

Además de lo anterior es sobradamente conocida la continua y vital influencia de la física clásica en la gestación y desarrollo de las primeras ideas cuánticas, entre 1900 y 1925. Esta relación llegó incluso a quedar plasmada en un verdadero cuerpo de doctrina mixto, entre clásico y cuántico, conocido como "the old quantum theory" (TOQT de ahora en adelante). Aunque siempre incompleta y provisional, TOQT logró importantes éxitos, cualitativos y cuantitativos, en campos tan dispares como, por ejemplo, la teoría de la radiación, la naturaleza de los espectros atómicos, la influencia sobre éstos de campos eléctricos y magnéticos, o la tabla periódica de los elementos (Ter Haar, 1967; Hermann, 1971).

El análisis de los episodios que jalonan la existencia de TOQT muestra cómo surgieron y fueron tomando cuerpo gérmenes de conceptos hoy sólidamente instalados en la física. Gran parte de estas nuevas ideas nacen y se desarrollan en agitada convivencia con la mecánica de Newton, el electromagnetismo de Maxwell y los métodos estadísticos de Boltzmann, Gibbs y Einstein. El papel de la física clásica resultó fundamental para el

establecimiento de dos pilares básicos sobre los que se asentaba TOQT: el principio adiabático (Klein, 1970: 264-292), que proporcionaba un método para descubrir los posibles estados cuánticos, y el principio de correspondencia (Darrigol, 1992: 79-284), que regulaba las transiciones entre dichos estados.

Bohr abordó en 1913 la tarea de establecer un modelo general para átomos, fructificando así parte de la semilla cuántica sembrada con profusión en el Primer Congreso Solvay, en 1911. Dentro del mismo marco se podría encuadrar la aparición de otras reglas de cuantización más generales, como las establecidas por Debye, Planck, Wilson, Ishiwara y Sommerfeld, entre 1914 y 1916 (Jammer, 1966: 90-96).

Aunque tan diversas reglas no surgieron como particularizaciones de un principio general, sino más bien como ingeniosas aportaciones individuales, el principio adiabático sí proporcionó, aunque con limitaciones importantes, una fundamentación común para todas las reglas de cuantización existentes, y un método de corte esencialmente clásico para deducir otras nuevas; un somero análisis del mismo, desde una perspectiva histórica, es el objetivo básico de este trabajo. El principio de correspondencia, el otro gran soporte de TOQT, establecía cómo utilizar la física clásica en la búsqueda de las características de las transiciones entre aquellos estados cuánticos.

El principio de correspondencia se puede, y se suele, entender como la constatación de que la teoría cuántica coincide con la clásica, cuando los números cuánticos resultan muy elevados. Pero su papel heurístico en la evolución de TOQT fue mucho más relevante del que correspondería a un test de validez. Su empleo para la obtención de resultados se basó en un corolario: en buena lógica, cabe pensar que esa peculiar conexión, mezcla entre analogía y correspondencia, que parecía relacionar física clásica con física cuántica, debe seguir siendo válida para números cuánticos no necesariamente grandes. Entendido así, el principio de correspondencia deja de ser un simple test hasta convertirse en la guía adecuada para la apertura de nuevos horizontes en el desarrollo de la teoría cuántica.

Aunque sólo sea por razones de completitud, vale la pena resaltar aquí que uno de los graves problemas abordados por medio de TOQT fue el llamado "efecto Zeeman anómalo", ante el que todo intento de explicación en términos clásicos se venía estrellando desde el descubrimiento de aquél, a finales del siglo pasado. Al confirmar los experimentos, cada vez con mayor claridad, que todos los multipletes mostraban dicho efecto, mientras que para los singletes sólo aparecía el "efecto Zeeman normal", explicable por la teoría clásica de Lorentz, en la mente de los más estaba que la solución completa del enigma pasaba por clarificar previamente la estructura de los multipletes. Hay que hacer constar aquí que las investigaciones de Catalán abrieron importantes y nuevas perspectivas al poner de manifiesto la existencia de estructuras más complejas que los usuales singletes, dobletes y tripletes detectados por entonces; de hecho él fue el introductor del término "multiplete" (Catalán, 1923: 146).

A pesar de no ser el objeto de este trabajo, conviene destacar que tanto el efecto Zeeman anómalo, como también la tabla periódica de los elementos, fueron explicados en 1925, utilizando los recursos que TOQT ofrecía. Aunque parecían dos problemas formalmente distintos, resultaron íntimamente relacionados por su solución, que pasaba en ambos casos por el desvelado de cómo se distribuían los electrones en los átomos complejos. Esta lucha por comprender la estructura atómica fue la clave que condujo a Pauli

hasta el principio de exclusión, y a Uhlenbeck y a Goudsmit a la idea de espín electrónico; todo ello dentro del marco de TOQT (Jammer, 1966: 118-156).

El principio adiabático de Ehrenfest (1916)

La justificación, el enunciado, las aplicaciones y hasta las deficiencias del principio adiabático se encuentran en un trabajo que vio la luz en, al menos, cuatro ocasiones diferentes entre 1916 y 1917 (Ehrenfest, 1916). La razón para tal multiplicidad de publicaciones de un mismo trabajo, salvo ligerísimas variaciones, es atribuida por Klein (1970: 283-287) al deseo por parte de Ehrenfest de que su contribución no quedara inadvertida, a la vista de experiencias negativas anteriores. Es usualmente considerado un trabajo magistral, que conjuga la claridad de exposición con el rigor metodológico, y cuyo contenido resulta imprescindible analizar con vistas a cualquier consideración de tipo historiográfica sobre el papel jugado por los invariantes adiabáticos en TOQT. Aquí nos limitaremos a señalar algunos puntos que consideramos relevantes para dicho fin.

Extraña, a primera vista, que entre los intentos por establecer un método para descubrir posibles estados cuánticos figure a la cabeza un principio adiabático ¿Qué relación puede haber entre "cuántico" y "adiabático"? En la introducción del trabajo señalado Ehrenfest menciona un episodio, al que se refirió en diversas ocasiones, que proporciona pistas inequívocas (Ehrenfest, 1916; Klein, 1970: 378):

"Wien's law has been found by an application of classic principles: the changes of the distribution of the energy over the spectrum and the work done by a reversible adiabatic compression are calculated quite according to classic electrodynamics. This law derived without the use of quanta stands unshaken amid the quantum theory. This fact now is worth our attention".

Es decir, la motivación inicial de Ehrenfest parecía dirigirle hacia la búsqueda de una explicación coherente para el sorprendente hecho de que la ley del desplazamiento de Wien, a la que se llegó por razonamientos enteramente clásicos, mantuviera plena validez dentro del ámbito de la teoría cuántica. Valga anticipar aquí que Ehrenfest logró este propósito, precisamente, a través del principio adiabático.

En la formulación propuesta por Ehrenfest es básica la noción de "modificación adiabática reversible". Sean q_1, \dots, q_n las coordenadas generalizadas de un sistema mecánico cuya energía potencial depende, además, de ciertos parámetros a_1, a_2, \dots que varían lentamente con el tiempo. Supóngase que la energía cinética T es una función cuadrática homogénea de las velocidades generalizadas, con coeficientes que pueden depender de las coordenadas q_i y de los parámetros a_i . Por $\beta(a)$ se representa un movimiento original del sistema correspondiente a los valores a_1, a_2, \dots de los parámetros, y por $\beta(a')$ otro movimiento del sistema correspondiente a a'_1, a'_2, \dots . Se dice que los movimientos $\beta(a)$ y $\beta(a')$ están "relacionados adiabáticamente", o que sobre el sistema se ha ejercido una "modificación adiabática reversible" si a los valores a'_1, a'_2, \dots se ha llegado por un cambio infinitamente lento de los valores originales a_1, a_2, \dots . Pero en una descripción puramente

mecánica como la anterior ¿cuál es el significado preciso que cabe asignar a los términos "adiabático" y "reversible"? Veámoslo.

Ehrenfest denomina "invariantes adiabáticos" a las magnitudes físicas que permanecen constantes en el cambio del movimiento $\beta(a)$ al movimiento $\beta(a')$, relacionado adiabáticamente con el anterior. En el apéndice I del trabajo comentado se incluye la demostración, basada en resultados anteriores de Boltzmann, de que el cociente \bar{T}/ν (donde \bar{T} representa la energía cinética media y ν la frecuencia, para el caso de un movimiento periódico) es un invariante adiabático (Ehrenfest, 1916; Klein, 1959: 378). En esta demostración se encuentra la clave del primero de los interrogantes: sólo en una modificación adiabática, en la que toda la energía invertida en cambiar el valor de los parámetros se incorpora íntegramente al sistema, se obtiene el resultado indicado.

Para Ehrenfest, el carácter reversible con el que se ha calificado la variación de los parámetros a_1, a_2, \dots , no necesita mayor justificación si el movimiento es periódico. En efecto, si desde un movimiento periódico se obtiene otro por modificación adiabática del primero, restituyendo a los parámetros sus valores de partida, con lentitud infinita, se recupera exactamente el movimiento original. Pero aquel calificativo carece de sentido cuando el movimiento es aperiódico (Ehrenfest, 1916; Klein, 1959: 381). En el caso de una trayectoria hiperbólica, por ejemplo, en un campo de fuerzas newtoniano, el término "reversible" pierde su significado: por modificación adiabática, es un decir, de la masa gravitatoria central es posible variar y luego reobtener el valor inicial de ésta, pero ello no implica la recuperación exacta del movimiento original, pues la situación de partida resulta inaccesible según este proceso.

Los movimientos multiperiódicos (o condicionalmente periódicos, como también se les denomina a veces) fueron pronto incorporados a la disciplina de TOQT, a través de su descripción en términos de las variables acción-ángulo. Fue J.M. Burgers, discípulo y colaborador de Ehrenfest en Leyden, quien, a sugerencia de su maestro, demostró que estas variables de acción son auténticos invariantes adiabáticos (Jammer, 1966: 102-106).

En cuanto a los movimientos aperiódicos generales cabe aclarar que nunca encajaron plenamente en el ámbito de aplicación del principio adiabático, ni tampoco en el de TOQT. Pero ello no representó un verdadero problema, dado lo inadecuado de estos movimientos para describir estados que impliquen un cierto grado de localización, como es el caso de los estados atómicos.

El enunciado previamente bautizado por Einstein (1914: 826) como "hipótesis adiabática de Ehrenfest" rezaba así (Ehrenfest, 1916; Klein, 1959: 381):

"For a general set of parameter values a_1, a_2, \dots only those motions are possible that are adiabatically related with motions possible for the special values a_{10}, a_{20}, \dots (that is which can pass into these by a reversible change)".

Ciertamente en el enunciado anterior no hay referencia explícita a movimientos periódicos, pero ello va implícito en la formulación, ya que, como se puso de manifiesto anteriormente, sólo en ese caso tiene sentido utilizar el término "reversible".

Principio adiabático y estados cuánticos. Ley de Wien

Se trata ahora de establecer el puente que permite relacionar el principio adiabático y las reglas de cuantización de TOQT. La propia definición de invariantes adiabáticos implica que si uno cualquiera de éstos sólo pudiera tomar valores numéricos discretos en el conjunto de los movimientos posibles correspondientes a a_{10} , a_{20} , ..., el invariante en cuestión sólo podría tomar esos mismos valores numéricos discretos en el conjunto de los movimientos posibles correspondientes a valores arbitrarios de los parámetros a_1 , a_2 , ..., siempre que se tratara de una modificación adiabática reversible. Dado que, en virtud del principio adiabático, en estas transformaciones los movimientos posibles se convierten en movimientos posibles, la forma más natural de expresar reglas de cuantización (limitaciones a los movimientos posibles del sistema) sería hacerlo en términos de invariantes adiabáticos.

Una regla de cuantización para determinada clase de movimientos, expresada en forma de limitación de los valores posibles discretos para un cierto invariante adiabático, sería igualmente válida para movimientos relacionables adiabáticamente con los primeros. Es decir, una regla de cuantización, expresada como se acaba de indicar y de validez contrastada experimentalmente, puede extender así su dominio de validez a sistemas con movimientos que pueden diferir notablemente de los originales: basta que ambos conjuntos de movimientos sean relacionables adiabáticamente. Veamos algunos ejemplos que ilustren acerca del sentido y de la potencialidad de esta idea de Ehrenfest.

Como se ha indicado antes, $2\bar{T}/v$ es un invariante adiabático para movimientos periódicos. Esta expresión, para el caso de oscilaciones armónicas unidimensionales, coincide con ϵ/v , siendo ϵ la energía del movimiento. Dado que la regla de cuantización de Planck restringe este invariante adiabático a valores múltiplos enteros de la constante de Planck h , la regla de cuantización $2\bar{T}/v = nh$, ($n = 1, 2, 3, \dots$), será válida, además, para todo movimiento relacionable adiabáticamente con las oscilaciones armónicas.

Ehrenfest dedica una buena parte del resto de su trabajo a buscar generalizaciones de la regla de cuantización de Planck, a la luz del principio adiabático; es decir, a analizar movimientos relacionables adiabáticamente con las oscilaciones armónicas. Un resultado previo de Sommerfeld permite escribir el invariante adiabático indicado en una forma mucho más apta para aplicaciones subsiguientes (Ehrenfest, 1916; Klein, 1959: 383-384):

$$2\bar{T}/v = \sum_h \iint dq_h dp_h \quad (1)$$

donde q_1, \dots, q_n representan las coordenadas generalizadas y p_1, \dots, p_n los momentos correspondientes. Cada uno de los n sumandos de la expresión anterior representa así el área de la proyección de la trayectoria en el espacio de las fases sobre el subespacio bidimensional asociado a cada grado de libertad.

La expresión del invariante adiabático en la forma (1) permitió a Ehrenfest lograr varios objetivos, entre los que cabe destacar:

- (i) La obtención de la regla de cuantización de Debye para oscilaciones anarmónicas unidimensionales, al ser éstas relacionables adiabáticamente con las armónicas, y, por tanto, extendible la regla de cuantización de Planck (Ehrenfest, 1916; Klein, 1959: 385-386).
- (ii) La obtención de la regla de cuantización de Bohr, y las más generales de Sommerfeld,

para el movimiento plano debido a una fuerza central newtoniana (Ehrenfest, 1916; Klein, 1959: 387-388).

Epílogo

Es éste el momento de volver al interrogante planteado acerca de la sorprendente validez de la ley de Wien, dentro del ámbito cuántico. Recuérdese que dicha ley establecía, sobre la base de consideraciones de naturaleza termodinámica exclusivamente, que la densidad espectral $\rho(\nu, T)$, siendo T la temperatura absoluta, se podía escribir en la forma $\nu^3 F(\nu/T)$, representando F una cierta función por determinar. El factor de conversión de energía por modo de vibración $\epsilon(\nu, T)$ a densidad de energía $\rho(\nu, T)$ es $8\pi\nu^2/c^3$ (el número de modos de vibración, por unidad de volumen, correspondiente a la frecuencia ν , siendo c la velocidad de la luz en el vacío). De modo que la ley de Wien también se puede escribir en la forma $\epsilon(\nu, T)/\nu = G(\nu/T)$, donde esta nueva función G sólo difiere de la anterior F en un factor constante, independiente de ν y de T .

Esta última formulación de la ley de Wien expresa una relación entre dos invariantes adiabáticos: $\epsilon(\nu, T)/\nu$, ya citado anteriormente para las oscilaciones unidimensionales, y ν/T , para la compresión adiabática de la radiación (Jammer, 1966: 98). Por otra parte, cabe insistir en que en toda modificación adiabática, en virtud del principio adiabático, no se altera el número de estados accesibles: los posibles se transforman en posibles.

Con estas premisas, es posible arrojar cierta luz sobre el enigma en torno a la ley de Wien. Al deducirse ésta mediante consideraciones acerca de una modificación adiabática (la indicada compresión adiabática de la radiación en equilibrio térmico dentro de una cavidad), y al poderse formular la ley en términos de invariantes adiabáticos, el resultado mantiene su validez en todo el proceso; es decir, para todo valor de ν y de T . Además, su enunciado no queda alterado por la inclusión o no de hipótesis cuánticas adicionales, pues éstas no juegan papel alguno en el proceso, al no alterarse en éste los estados posibles, en virtud del principio adiabático. Una hipótesis cuántica, como la de Planck, sólo interviene para acotar el conjunto de valores discretos posibles para dichos invariantes, pero no es relevante para las relaciones entre éstos.

Una vez puesto de manifiesto que los resultados obtenidos por consideraciones de tipo clásico acerca del comportamiento de ciertos invariantes adiabáticos, en una determinada modificación adiabática, mantienen su vigencia dentro de la teoría cuántica, es fácil captar el sentido de la reflexión con la que Ehrenfest concluía su trabajo (Ehrenfest, 1916; Klein, 1959: 393):

"But at any rate I believe that in view of Wien's law it must be given in the quantum theory a special place to the reversible adiabatic processes".

Bibliografía

- CATALÁN, M.A. (1923), "Series and other regularities in the spectrum of manganese", *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 223, 127-173.
- DARRIGOL, O. (1992), *From c-numbers to q-numbers: the classical analogy in the history of quantum theory*, Berkeley, University of California Press.
- EHRENFEST, P. (1916), "On adiabatic changes of a system in connection with the quantum theory", *Proc. Acad. Amsterdam*, 19, 576-597. Reproducido en Klein (1959: 378-399).
- EINSTEIN, A. (1914), "Beitrage zur Quantentheorie", *Verhandlungen der deutschen physikalischen Gesellschaften*, 16, 820-828.
- HERMANN, A. (1971), *The genesis of quantum theory (1899-1913)*, Cambridge, Mass., MIT Press. (La edición alemana original es de 1969).
- JAMMER, M. (1966), *The conceptual development of quantum mechanics*, New York, Mc-Graw Hill.
- KLEIN, M.J. (1959), *Paul Ehrenfest. Collected scientific papers*, Amsterdam, North-Holland.
- KLEIN, M.J. (1970), *Paul Ehrenfest. The making of a theoretical physicist*, Amsterdam, North-Holland.
- TER HAAR, D. (1967), *The old quantum theory*, Oxford, Pergamon Press.