

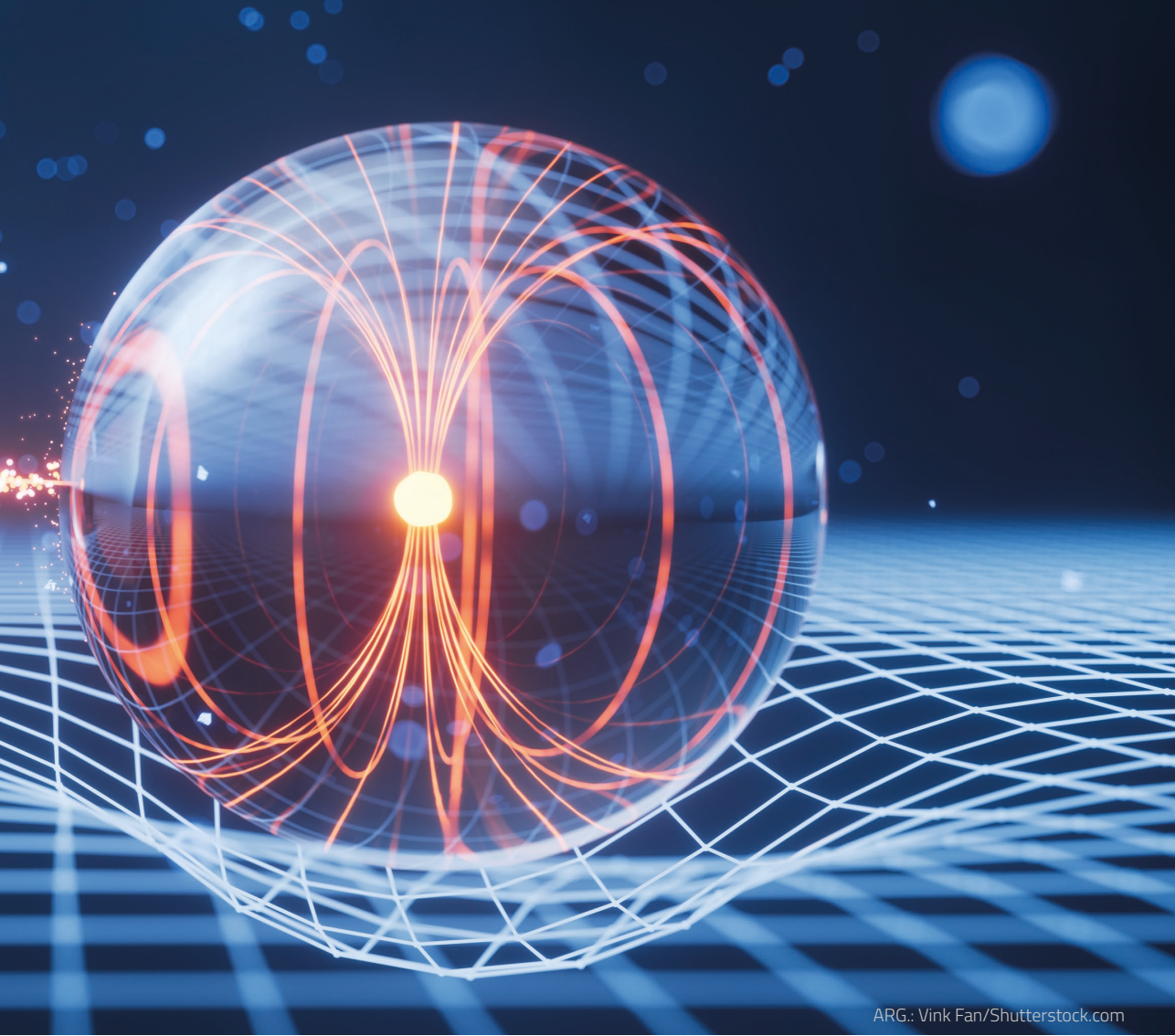
# Mekanika kuantikoaren lehen

2025ean, ehun urte betetzen dira mekanika kuantikoaren lehen oinarriak proposatu zirenetik. Efemerride horren harira, UNESCOk Zientzia eta Teknologia Kuantikoen Nazioarteko Urtea izendatu du aurten goa, teoria kuantikoak eta handik eratorritako teknologiek duten garrantzia gizarteratzeko.

Helburu horrekin, *Elhuyar* aldizkariak galdera zehatzak egin dizkie kimika eta fisika kuantikoaren arloan bi esparru desberdinetan dabilzan bi zientzialariri: Oier Lakuntza Irigoien CIC Energiguneko ikertzaileari, eta Elixabete Rezabal Astigarraga EHUKo Kimika Teorikoko taldekideari:

“Zure ustez, zein izan dira mekanika kuantikoaren mugarri esanguratsuenak, ezagutzan eta aplikazioan? Horrez gain, mekanika kuantikoaren garapenak zer emango du etorkizunean? Zer aurreikusten duzu epe labur-ertainera?”

Esanguratsua da biek ere antzeko erreferente historikoak aipatzea mugarriztat: ehun urte hauetan emandako pausoak sendoak eta argiak diren seinale. Etorkizunera begira, berriz, batek aplikazioetan jarri du begirada, gogoetan besteak. Zalantzarik gabe, biak dira beharrezkoak eta osagarriak, aldi berean.



ARG.: Vink Fan/Shutterstock.com

## oinarrien 100. urteurrena

**Oier Lakuntza Irigoien**  
CIC Energiguneko ikertzailea



**Kimika kuantikoa,  
mekanika kuantikoaren  
ondorio nagusietako bat**

**Elixabete Rezabal Astigarraga**  
EHUko Kimika Teorikoko taldekidea



**Zientzia modernoaren  
oinarriko zutabea**

## Oier Lakuntza Irigoien

CIC Energiguneko ikertzailea



ARG.: CIC Energigune

XIX. mendean topatutako zenbait fenomeno, hala nola gorputz beltzaren erradiazioa edo espektrum atomikoak, ezin zituen azaldu Newtonen legeen eta Maxwellen elektromagnetismoaren legeen arabera eratutako mekanika klasikoak. Horren harira, gaur egun mekanika kuantiko gisa ezagutzen duguna osatzeari ekin zioten. Prozesu hartan, mugarrri garrantzitsu batzuk ezarri ziren. Haietako lehenengoa izan zen Max Planckek 1900. urtean adieraztea erradiazio elektromagnetikoaren energia kuantizatutako zegoela; hau da, uhin-luzera edo frekuentzia jakin bateko erradiazioaren energiak ezin zuela edozein balio hartu, eta  $E=h\nu$ -ren ( $h$  Plancken konstantea eta  $\nu$  frekuentzia izanik) multiploa izan behar zuela.

Horren ostean, 1905ean, Albert Einsteinek efektu fotoelektrikoa azaldu zuen; hots, adierazi zuen zenbait metaletan erradiazio elektromagnetikoak elektroi batzuk askatzea eragin zezakeela, eta, ha-

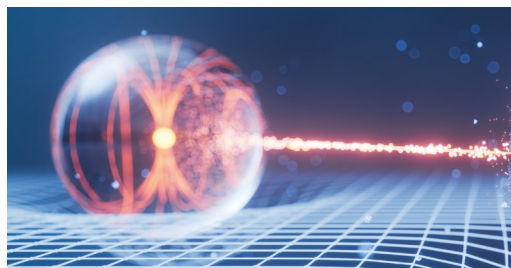
laber, erradiazio elektromagnetikoa fotoiz osatua zegoela, eta argiak materia erasotzen zuenean elektroi bakoitza, fotoi baten energia hartuta, metalaren egituratik atera zitekeela, baldin eta energia hori balio batetik gorakoa bazen.

Bukatzeko, Louis De Brogliek, 1923an, uhin-korpuskulu izaera bikoitzaren printzipioa ezarri zuen. Printzipio horren arabera, elektroiak eta bestelako atomo mailako egiturek aldi berean uhin eta korpuskulu izaera zuten, eta uhin-luzera  $m\cdot v$  momentu linealaren arabera zuten:

$$\lambda = h/mv$$

Izaera bikoitz horrek ahalbidetzen zuen haietan gertatzen ziren fenomeno guztiak azaltzea. Esate baterako, elektroi-hari batek, zirrikitu batetik pasatzean, erradiazioaren moduko difrakzio-patroiak ematen zituen.

Printzipio horiek kontuan izanik, 1925ean, Werner Heisenberge eta Erwin Schrödingerrek, bakoitzak bere aldetik, Mekanika matritzial eta Uhin Mekanika gisa ezagutzen direnak formulatu zituzten. Aldi batez elkarren lehian ere aritu ziren, nor berea defendatu eta besteak egin zuenari balioa kendu nahirik. 1926an, ordea, Erwin Schrödingerrek be-



# Kimika kuantikoa, mekanika kuantikoaren ondorio nagusietako bat

rak frogatu zuen bi adierazpenak bateragarriak zirela.

Bukatzeko, 1928an, Paul Diracek mekanika kuantikoa eta erlatibitatearen teoria elkartu zituen, eta, hala, lekua egin zion spin magnitudeari.

## Kimika kuantikoaren sorrera

Esan daiteke kimika kuantikoa bera dela mekanika kuantikoaren ondorio edo aplikazio nagusietako bat. Izan ere, Schrodingerren ekuazioa ebatziz sistema kimiko baten bilakaera azter daiteke, laborategi batean sartu gabe. Eta horrek aukera ematen du oraindik sintetizatu ez diren egiturak aztertze-ko edo laborategian lortu ezin diren eta muturreko kondizioetan gertatzen diren fenomenoak aztertze-ko. Ekuazio hori, ordea, elektroi bakarreko sistematarako soilik ebatz daiteke analitikoki. Gainerako kasuetarako, era askotako hurbilketak garatu dira.

Zentzu horretan, kimika kuantikoaren barruan mugarri garrantzitsua izan zen Dentsitatearen Funtzionalaren Teoria (DFT). 1965ean Kohn eta Shamek eman zuten garapenaren bitartez, sistema osoaren energia elektroi-dentsitatearen funtzional gisa adierazten da, eta, beraz, aski da

elektroi guztien koordenatuak jakin beharrea (3N aldagai) elektroi-dentsitatea (hiru aldagairen arabera) jakitea. Kontua da ez dakigula nolakoa den dentsitatearen funtzional horren forma zehatza, eta, gaur egun, funtzional ezberdin bat erabiltzen da sistema-mota bakoitzerako.

## Adimen artifiziala lagun

Kimika kuantikoaren arazoetako bat da kostu konputazional handia duela. Azken batean, mekanika kuantikoaren ekuazioak ebatzen direnean, beharrezkoa da atomoen elektroiak esplizituki kontuan hartzea. Zentzu horretan, gaur egun, ikasketa automatizatuaren bitartez, posible da DFTren antzeko zehaztasuna daukaten indar-eremuak lortzea. Horrek asko laguntzen du egitura solidoen sistema periodikoen azterketan, superzelda handiagoen azterketa ahalbidetzeaz gain dinamika molekularretan askoz denbora-tarte luzeagoak simulatu ahalko bailirateke.

Funtsean, uste da era horretan mekanika klasikoaren kostu konputazionalarekin mekanika kuantikoak adinako zehaztasuneko emaitzak lor daitezkeela. ●

# Zientzia modernoaren oinarrizko zutabea

Azken mendean, mekanika kuantikoak sakon eraldatu du gure inguru ulertzeko dugun modua. Fisika klasikoak fenomeno atomikoak azaltzeko zituen zailtasunei erantzuteko ahalegin gisa jaio, eta berehala loratu zen, eta materiaren eta energiaren portaera arautzen duen esparru teoriko sofistikatu bat sortu zuen. Werner Heisenberg fisikari alemaniar gaztearen ekarpena mugarri izan zen mekanika kuantiko modernoaren garapenean. 1925ean, fisika klasikotik nabarmen urruntzen zen artikulu bat argitaratu zuen. Hartan, "mekanika kuantiko" bat proposatu zuen, kontzeptu behaezinak —hala nola elektroio-orbitak— albo batera utzi eta kantitate behagarrietan —energia eta trantsizio-anplitudeak—oinarritzen zena. Hasiera batean ikuspegi hura arrazoi praktikoengatik hau-

tatu zuen arren, fenomeno atomikoak ulertu eta azaltzeko moduan erabateko aldaketa ekarri zuen laster. Lan hori da, hain zuzen ere, Nazio Batuek mekanika kuantikoaren jaiotzari data bat jartzeko hautatu dutena.

Jarraian etorri ziren, Schrödinger, Bohr, Jordan, Born eta beste hainbaten ekarpenak, eta, 1927rako, mekanika kuantikoaren teoria osatua zegoen. Kopenhageko interpretazioa deritzona gailendu zen teoria berri hura ulertzeko. Interpretazio haren oinarrizko printzipioa da mekanika kuantikoak partikulak egoera edo kokapen jakin batzuetan aurkitzeko probabilitateak soilik ematen dituela. Are gehiago, behatzaileak, neurketa egitean, partikularen egoera edo kokapena aldatu eta determinatu egiten ditu, eta, beraz, atomoaren barruan gertatzen dena azaleratzeko gure gaitasuna mugatua dago erabat.

Argi dago interpretazio horrek inplikazio filosofiko sakonak dituela, eta, fenomeno-sorta zabal bat azaltzeko arrakasta izan zuen arren, eztabaida biziak piztu zituen fisikarien artean ere. Mekanika kuantikoaren munduan nagusi dira probabilitatea,







### Elixabete Rezabal Astigarraga

EHUko Kimika Teorikoko taldekidea

ziurgabetasuna eta behatzailearen papera, eta horrek pentsamendu-aldaketa sakona ekarri zuen, halaberharrez. Mekanika kuantikoaren sortzaileentzat ere erronka izugarria izan zen kontzeptu berri haiek onartu eta barneratzea.

Eztabaida filosofikoak gorabehera, mekanika kuantikoak azkar egin zuen aurrera; gero eta arazo praktiko gehiago ebazten zituen. Lotura kimikoaren izaerari buruzko ikuspegi berriak eman zituen, desintegrazio erradioaktiboa azaldu zuen, eta solidoetan elektroiek duten portaeraren ulermena irauli eta materialen zientzian eta elektronikan aurrerapenak ekarri zituen.

Etorkizunari begira, mekanika kuantikoak berebiziko garrantzia izango du datozen erronkei erantzuna emateko. Konputazio kuantikoan adibidez, superposizioaren eta korapilaketaren printzipioak aprobetxatuz, ordenagailu klasikoekin konpondu

ezin diren arazoak konpontzeko gai diren ordenagailuak eraikitzen dihardute ikerlariek. Oinarrizko fisikan ere, unibertsoaren misterio sakonenak aztertzen ari dira, materia eta energia ilunaren izaera jorratuz. Denborak esango digu ea lortzen den mekanika kuantikoa eta erlatibitate orokorra batzen dituen teoria bat garatzea.

Ehun urte pasata, gaur egun esan dezakegu zientzia modernoaren oinarrizko zutabea dela mekanika kuantikoa. Zientzialarion mundu zehatz eta mikroskopikotik harago, gure egunerokotasunean behatzen duguna zalantzan jartzeko gonbita egiten digu guztioi mekanika kuantikoak, eta errealtatea ulertzeko modu erabat desberdin bat proposatzen. ●