

# ANALOGÍAS Y CONEXIONES EN LA FÍSICA

Coordinadores

Karen Volke ◉ Jorge Flores

Editores

Karen Volke ◉ Jorge Flores ◉ Octavio Miramontes ◉ Sergio Sánchez

Autores

Miguel Alcubierre • Mariano Bauer Ephrussi • Rubén Barrera  
Rafael Barrio • Carlos Bunge • Ana María Cetto • Germinal Cocho  
Luis de la Peña • Jorge Flores • Gerardo García Naumis • Ignacio Garzón  
Shahen Hacyan • Enriqueta Hernández • Adrián Huerta • Rocío Jáuregui  
Eugenio Ley-Koo • Pier Mello • Octavio Miramontes  
Alfonso Mondragón • Myriam Mondragón • Guillermo Monsivais  
Matías Moreno • Rosario Paredes • Rafael Pérez Pascual  
Rosalío Rodríguez • Víctor Romero • Daniel Sahagún  
Citlali Sánchez Ake • Sergio Sánchez • Iván Santamaría  
Miguel Ángel Solís • Jorge Seman • Claude Thions • Genaro Toledo  
Manuel Torres • Alfred U'Ren • Andrea Valdés Hernández  
Alejandro Vásquez • Mayo Villagrán • Carlos Villarreal • Karen Volke

**CopIt-arXives**

Publishing Open Access

with an Open Mind

2020

Este libro contiene material protegido por las leyes de autor

Todos los derechos reservados © 2020

Publicado digitalmente en México, por CopIt-arXives

Coordinado por Karen Volke, Jorge Flores

Editado por Karen Volke, Jorge Flores, Octavio Miramontes y Sergio Sánchez

Diseño de portada: Luis Novoa. Foto de portada: Trevor Cox

*Analogías y Conexiones en la Física*

Karen Volke, Jorge Flores, Octavio Miramontes y Sergio Sánchez. — México CDMX:

CopIt-arXives, 2020

Incluye bibliografía e índice

ISBN: 978-1-938128-19-6 ebook

### **Derechos y permisos**

Todo el contenido de este libro es propiedad intelectual de sus autores quienes, sin embargo, otorgan permiso al lector para copiar, distribuir e imprimir sus textos libremente, siempre y cuando se cumpla con lo siguiente: (i) el material no debe ser modificado ni alterado, (ii) la fuente debe ser citada siempre y los derechos intelectuales deben ser atribuidos a sus respectivos autores, (iii) estrictamente prohibido su uso con fines comerciales.

El contenido y puntos de vista planteados en cada capítulo es responsabilidad exclusiva de los autores y no corresponden necesariamente a los de los editores o a los de ninguna institución, incluidas CopIt-arXives o la UNAM.

Producido con software libre incluyendo L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X. Indexado en el catálogo de publicaciones electrónicas de la UNAM y en Google Books.

Todas las figuras e imágenes son cortesía de [www.wikimedia.org](http://www.wikimedia.org) o bien de los autores, a menos que se señale lo contrario explícitamente.

Los editores agradecen el apoyo de DGAPA-UNAM a través de los proyectos PAPIIT IN-105015, IN-103516 e IN-107619

**ISBN: 978-1-938128-19-6 ebook**

<http://scifunam.fisica.unam.mx/mir/copit/>

**Este libro ha pasado por revisión de pares**

**CopIt-arXives**

Cd. de México - Cuernavaca - Madrid - Curitiba

Viçosa - Washington DC - London - Oxford

Con el apoyo de la

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Instituto de Física

## CONTENIDO

PREFACIO	IX
INTRODUCCIÓN	XIII
<b>I ALGUNOS PRINCIPIOS GENERALES</b>	<b>1</b>
1. SIMETRÍAS CLARAS Y OCULTAS <i>Germinal Cocho Gil</i>	3
2. LA MECÁNICA CLÁSICA DEL SIGLO XX <i>Rafael Pérez Pascual</i>	15
3. EL TIEMPO Y SU FLECHA <i>Mariano Bauer Ephrussi</i>	31
4. EL PRINCIPIO DE RELATIVIDAD <i>Jorge Flores Valdés</i>	43
5. LOS PRINCIPIOS VARIACIONALES <i>Jorge Flores Valdés</i>	49
6. EL PRINCIPIO DE EQUIVALENCIA Y LA RELATIVIDAD GENERAL <i>Shahen Hacyan</i>	57
7. TRANSFORMACIONES DE NORMA EN DINÁMICAS CLÁSICA, ELECTROMAGNÉTICA Y CUÁNTICA: SUS CONEXIONES <i>Eugenio Ley Koo</i>	67

<b>II ONDAS POR TODOS LADOS</b>	<b>85</b>
8. RESONANCIAS A DIFERENTES ESCALAS <i>Mayo Villagran Muniz</i>	87
9. EL EFECTO TÚNEL... ¿EN SISTEMAS CLÁSICOS? <i>Daniel Sahagún</i>	95
10. GUÍAS DE ONDA Y RESONADORES <i>Citlali Sánchez Aké</i>	109
11. ONDAS DE ESPÍN <i>Guillermo Monsivais</i>	119
12. SOLITONES: LAS ONDAS QUE SE COMPORTAN COMO PARTÍCULAS <i>Karen Volke</i>	129
13. ONDAS GRAVITACIONALES <i>Miguel Alcubierre</i>	145
<b>III SISTEMAS CLÁSICOS ANÁLOGOS</b>	<b>159</b>
14. LOS CAMINOS EXTREMOS DE LA LUZ <i>Rubén G. Barrera</i>	161
15. ¿POR QUÉ EL TROMPO QUE GIRA NO SE CAE? <i>Jorge Flores Valdés</i>	177
16. LAS CAPRICIOSAS TRAYECTORIAS DE LAS BOLAS EN EL BILLAR Y EN LOS DEPORTES <i>Jorge Flores Valdés</i>	185
17. EL SISTEMA PLANETARIO <i>Jorge Flores Valdés</i> <i>Sergio Sánchez</i>	195

---

<b>IV TERMODINÁMICA, TRANSICIONES DE FASE Y FÍSICA ESTADÍSTICA</b>	<b>201</b>
18. LAS LEYES DE LA TERMODINÁMICA... ¿SON CUATRO? <i>Rosalío Rodríguez Zepeda</i>	203
19. EL BAILE DE LAS MOLÉCULAS <i>Adrián Huerta</i>	211
20. LA TERMODINÁMICA DE LOS PROCESOS IRREVERSIBLES: EQUILIBRIO O NO EQUILIBRIO, HE ALLÍ LA CUESTIÓN <i>Iván Santamaría Holek</i>	219
21. CUANDO LA MATERIA SE SOMETE A MUY ALTAS PRESIONES <i>Claude Thions Chaudy</i>	231
22. TRANSICIONES DE FASE <i>Gerardo García Naumis</i>	239
23. ESTADOS METAESTABLES <i>Alejandro Vásquez Arzola</i>	255
24. CUANDO LA ESTADÍSTICA DOMINA A LA FÍSICA <i>Pier A. Mello</i>	265
<b>V CAOS Y SISTEMAS COMPLEJOS</b>	<b>277</b>
25. EL CAOS DINÁMICO <i>Rafael Pérez Pascual</i>	279
26. LOS SISTEMAS COMPLEJOS <i>Octavio Miramontes</i>	293
27. LA FÍSICA EN LA BIOLOGÍA <i>Rafael Ángel Barrio Paredes</i>	303

<b>VI MECÁNICA CUÁNTICA</b>	<b>313</b>
<b>28. LAS PARTÍCULAS TAMBIÉN SE DIFRACTAN</b> <i>Ana María Cetto</i>	<b>315</b>
<b>29. PARTÍCULAS IDÉNTICAS E INDISTINGUIBILIDAD</b> <i>Miguel Ángel Solís</i>	<b>327</b>
<b>30. CUASIPARTÍCULAS ... ¿SON REALES?</b> <i>Víctor Romero Rochín</i>	<b>337</b>
<b>31. CUANDO NEWTON Y SCHRÖDINGER SE ENCUENTRAN</b> <i>Andrea Valdés Hernández</i>	<b>343</b>
<b>32. PROBANDO ENTENDER LA MECÁNICA CUÁNTICA</b> <i>Luis de la Peña</i>	<b>351</b>
<b>33. FOTONES ENREDADOS</b> <i>Alfred B. U'Ren</i>	<b>361</b>
<b>34. CORRELACIONES CUÁNTICAS</b> <i>Rocío Jáuregui</i>	<b>373</b>
<b>35. FUERZAS DEL VACÍO CUÁNTICO</b> <i>Carlos Villarreal Luján</i>	<b>381</b>
<b>36. ¿ES POSIBLE OBSERVAR UN ESTADO CUÁNTICO A ESCALA MACROSCÓPICA?</b> <i>Jorge Amin Seman Harutinian</i>	<b>387</b>
<b>37. SIMULANDO TRANSICIONES DE FASE EN EL RÉGIMEN CUÁNTICO</b> <i>Rosario Paredes Gutiérrez</i>	<b>397</b>
<b>38. ESTADOS LIGADOS EN LAS ENERGÍAS DEL CONTINUO: OTRA CLASE DE ESTADOS LIGADOS</b> <i>Enriqueta Hernández</i> <i>Alfonso Mondragón</i>	<b>405</b>

---

<b>VII ÁTOMOS, MOLÉCULAS Y NANOPARTÍCULAS</b>	<b>417</b>
39. ÁTOMOS Y MOLÉCULAS COMO SISTEMAS AISLADOS: EL PAPEL DE LOS QUÍMICOS <i>Carlos F. Bunge</i>	419
40. ÁTOMOS Y MOLÉCULAS COMO SISTEMAS AISLADOS: EL PAPEL DE LOS FÍSICOS <i>Carlos F. Bunge</i>	433
41. ENTRE LO MACRO Y LO ATÓMICO ESTÁ LO NANO <i>Ignacio L. Garzón</i>	449
<b>VIII LAS PARTÍCULAS ELEMENTALES Y LA FÍSICA DE AL- TAS ENERGÍAS</b>	<b>459</b>
42. ACELERADORES DE PARTÍCULAS <i>Matías Moreno</i>	461
43. LA IMPORTANCIA DE LOS ANÁLOGOS CLÁSICOS EN LA RADIA- CIÓN CUÁNTICA <i>Genaro Toledo Sánchez</i>	477
44. GRAFENO: EFECTOS CUASI-RELATIVISTAS EN LA PUNTA DE UN LÁPIZ <i>Manuel Torres</i>	485
45. PRINCIPIO DE INVARIANCIA DE NORMA EN TEORÍAS DE CAMPO CUÁNTICAS <i>Eugenio Ley Koo</i>	495
46. FÍSICA MÁS ALLÁ DEL MODELO ESTÁNDAR <i>Myriam Mondragón</i>	513

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙



## PREFACIO

**P**ARA preparar este libro, hemos invitado a varias decenas de físicos, que en su mayoría trabajan en la Universidad Nacional Autónoma de México, a que presenten de manera sucinta sus ideas sobre distintos aspectos de la física, en los cuales han trabajado intensamente, tanto en investigación como en labores docentes. Contamos con autores de reconocida experiencia y larga trayectoria, pero también con jóvenes talentosos que forman parte de las nuevas generaciones de físicos. Esto aporta una gran variedad de estilos y puntos de vista, que sin duda enriquecen el texto en su conjunto. El resultado, creemos, es único en varios sentidos. Se analizan muchos problemas físicos que siempre se discuten por separado. Al enfatizar las analogías y conexiones en física, se resalta la unidad de esta ciencia, a veces difícil de percibir para los jóvenes que se inician en la investigación.

El libro se divide en ocho partes. No ha sido fácil ordenar contribuciones tan variadas en estos ocho casilleros, ya que hay capítulos que en realidad se encuentran en la intersección de dos o más áreas de la física. Más aun, si bien cualquier esfuerzo de organización podría parecer de alguna forma inapropiado cuando lo que se busca es establecer conexiones y analogías, consideramos que proponer algún tipo de orden aporta cierta claridad y puede orientar al lector. Sin embargo, queremos enfatizar que una virtud de este texto es que cada capítulo se puede leer como una contribución independiente, sin necesidad de seguir una secuencia específica. Así, el orden de lectura queda en realidad en manos de cada lector, según sus propios intereses, por lo que nuestra organización es tan sólo una sugerencia. En la tónica de establecer analogías, podríamos decir que este texto sería comparable con un libro de cuentos y no con una novela.

A manera de introducción, se presenta una breve reseña de cada capítulo, lo que puede encaminar al lector y servir también como motivación para adentrarse en su lectura. En la [Parte I](#) se incluyen algunos de los principios generales de la física teórica, que sientan bases fundamentales sobre las que se ha construido esta ciencia. En su conjunto, se comunican nociones que, a

nuestro entender —al menos en español— no se han publicado juntas.

Los fenómenos ondulatorios, que aparecen en sistemas y escalas muy diferentes, son los protagonistas de la [Parte II](#). Las ondas han permitido establecer conexiones en la física que se antojaban insospechadas, cimentando, por ejemplo, teorías como la electrodinámica y la mecánica cuántica. Por esta razón, no podrían estar ausentes cuando se pretende ilustrar cómo la construcción de analogías ha enriquecido el conocimiento científico y ampliado nuestra comprensión del Universo. Desde luego, este tema reaparece de manera recurrente en otras partes del libro, donde la discusión se centra sobre fenómenos cuánticos.

La [Parte III](#) está dedicada a revisar algunos problemas de física clásica desde una perspectiva no convencional, ya sea porque se presentan tratamientos alternativos que permiten establecer analogías y conexiones interesantes, o porque se discuten temas que suelen quedar al margen en libros de texto.

Otro tema ubicuo y de la mayor relevancia en física son las transiciones de fase. Éste se aborda en la [Parte IV](#) del libro, junto con otras nociones importantes y actualizadas de la termodinámica, incluyendo por ejemplo el caso de fenómenos irreversibles, que proveen una nueva perspectiva de esta área de la física. Y en este contexto, no podría faltar un tema fundamental: la física estadística. Éste no solo establece un puente entre la mecánica clásica, la termodinámica, la estadística y las matemáticas desarrolladas en la teoría de probabilidad, sino que hoy en día abarca el estudio de muchos otros sistemas que tienen una naturaleza inherentemente estocástica, dentro e incluso fuera de la física. Cabe mencionar que algunos capítulos en esta parte del libro sugieren experimentos caseros e incluyen algunas simulaciones en forma de material suplementario, al cual se puede acceder desde el vínculo que se encuentra en las respectivas referencias, al final de los mismos.

La [Parte V](#) del libro lleva por título: “Caos y sistemas complejos”. Aquí agrupamos tres capítulos que tienen como eje la emergencia de “la complejidad”, a partir de una dinámica no lineal subyacente, que establece conexiones inesperadas de la física y las matemáticas con muy diversas disciplinas, que van desde la biología y la química hasta la economía y el comportamiento social colectivo.

Nuestro recorrido por la física continúa, en la [Parte VI](#) del libro, adentrándonos en la mecánica cuántica. A lo largo de sus capítulos se analizan diferentes sistemas físicos, enfatizando las analogías entre la física clásica y la cuántica, cuando las hay, así como los límites en que la descripción

clásica no es capaz de aportar descripciones plausibles. Se discuten una variedad de experimentos sorprendentes y se consideran los límites en que las ecuaciones de movimiento cuánticas convergen con las clásicas. Se revisa la interpretación de la mecánica cuántica, haciendo notar que hay al menos una veintena de teorías alternas, no todas consistentes entre sí, que han sido propuestas.

Una vez que se tienen los elementos de la mecánica cuántica y de la física estadística, en la [Parte VII](#) del libro se aborda el tema de la estructura de la materia desde otro ángulo. Se presentan aquí tres capítulos que transitan desde el nacimiento de la teoría atómica, tanto desde el punto de vista de los químicos como de los físicos, que aportan visiones complementarias, hasta lo que ocurre cuando tenemos un número finito y pequeño de átomos o moléculas formando esos entes con personalidad propia que son las nanopartículas. Esto último es materia de lo que hoy conocemos como Nanociencia, y se da aquí una perspectiva de por qué lo que ocurre a estas escalas ha representado una revolución científica y tecnológica.

Por último, la [Parte VIII](#) de este libro se ocupa de algunos aspectos esenciales de la física de altas energías. Comenzando con los aceleradores de partículas, que han sido las herramientas fundamentales para dilucidar la estructura de la materia, se discute también cómo la electrodinámica cuántica combina la relatividad con la mecánica cuántica para describir las propiedades y las interacciones entre partículas elementales. En este contexto, se da un ejemplo sorprendente de analogías, que surge a través de descripciones matemáticas en común. Asimismo, se describe cómo se fue construyendo la teoría que llevó a la unificación de las interacciones electromagnética y débil, así como el desarrollo de la cromodinámica cuántica. Terminamos este viaje por la física actual echando una mirada a lo que podría ocurrir en un futuro no muy lejano: cómo dar respuesta a las preguntas que ha dejado sin resolver el Modelo Estándar y la excitante búsqueda de una teoría más fundamental.

Cabe mencionar que al preparar esta obra solicitamos a los autores que, en la medida de lo posible, prescindieran de referencias técnicas avanzadas y, en su lugar, sugirieran lecturas complementarias a nivel de divulgación, en la sección que llamamos “Para saber más”, al final de cada capítulo. Sin embargo, en algunos casos fue imposible excluir referencias avanzadas, y esto quedó a criterio de cada autor. Asimismo, hay capítulos que presentan un glosario y lista de acrónimos.

Consideramos que un texto como el que aquí presentamos contribuye a una labor que los científicos hispanoparlantes hemos descuidado en cierta

medida. En particular, con publicaciones como ésta se enriquece el léxico científico en español.

No podríamos terminar esta nota sin agradecer a toda la gente que estuvo involucrada para sacar adelante este proyecto. Por supuesto, en primer lugar a todos los autores, que hicieron posible la constitución de este texto con sus valiosas contribuciones, y particularmente, a Octavio Miramontes, quien además nos brindó la oportunidad de publicar la obra a través de la editorial Copit ArXives, que realiza la importante tarea de ofrecer literatura científica en español de forma gratuita y accesible. Vaya pues nuestro más alto reconocimiento a todos los fundadores de Copit ArXives, que contribuyen así a la formación de las nuevas generaciones de científicos en Iberoamérica. También agradecemos de manera muy especial al Físico Sergio Ángel Sánchez Chávez, quien además de ser coautor de uno de los capítulos, jugó un papel sumamente destacado en varias de las labores editoriales, como la de unir y compilar las contribuciones independientes en un sólo documento. De igual manera, agradecemos a la Sra. Maricela Barrera Gutiérrez por su invaluable apoyo como asistente.

Así pues, esperamos que este libro resulte un texto útil e interesante no sólo para jóvenes lectores que inician su carrera en la ciencia, sino también para colegas físicos y científicos en general, que desean echar un vistazo a áreas diferentes de su especialidad, de una forma sucinta y amena.

Karen Volke y Jorge Flores  
Ciudad Universitaria, CDMX, 29 de febrero de 2020

## INTRODUCCIÓN

ESTA obra se divide en ocho partes. Sin embargo, cada capítulo se puede leer como una contribución independiente, sin necesidad de seguir una secuencia específica. A continuación presentamos una breve reseña de cada capítulo, que esperamos sirva como guía y motivación para invitar a la lectura.

El libro comienza con un análisis, en la [Parte I](#), de los principios generales de la física teórica. En el diccionario en inglés se define *principle* como: *a law or doctrine used as a basis for others*. En el diccionario de la Real Academia Española se es más preciso: *un principio es base, origen, razón fundamental sobre la cual se procede discuriendo en cualquier materia; o también se le define como: cada una de las primeras proposiciones o verdades fundamentales por donde se empiezan a estudiar las ciencias o las artes*; de manera más abstracta, se dice que *un principio es una norma o idea fundamental que rige el pensamiento*. Consideramos, pues, que el material que se presenta en la [Parte I](#) corresponde en verdad a los principios de la teoría en física. La narración comienza en el [Capítulo 1](#) discutiendo un principio muy general: si un sistema presenta una simetría, es decir, si es invariante frente a una operación, existe una cantidad física que se conserva, o sea que no cambia con el tiempo. Cuando hay simetría sólo local, se genera la invariancia de norma. Finalmente, el autor presenta una serie de cuatro preguntas que se consideran básicas para continuar la investigación en el futuro cercano.

En el [Capítulo 2](#), se presenta la historia de la mecánica clásica en la primera mitad del siglo XX. En el siglo XIX, Liouville demostró que si un sistema mecánico tiene tantas cantidades conservadas como grados de libertad, el sistema es reducible a cuadraturas. Este teorema impulsó a muchos físicos a creer que la mecánica era ya una cuestión cerrada y sólo quedaría resolver casos concretos. Posteriormente, Henri Poincaré demostró la existencia de sistemas hamiltonianos no integrables, que son los genéricos, y entre los cuales se encuentra el problema de tres cuerpos. Al aparecer la relatividad y la mecánica cuántica, a principios del siglo XX, la atención de los físicos se concentró en estos nuevos campos y el problema de los siste-

mas no integrables fue casi olvidado, hasta mediados de los años sesenta, cuando las computadoras permitieron explorar numéricamente el comportamiento de estos sistemas, lo cual era antes imposible.

En el [Capítulo 3](#), se analizan diversas propiedades del tiempo, y se hace notar que aunque todo el mundo cree saber lo que éste es, los físicos no lo entienden cabalmente todavía. Se presenta el problema del tiempo en la mecánica cuántica, agravado por la teoría general de la relatividad, lo que plantea el problema del tiempo en la gravedad cuántica. A continuación se discuten varias flechas del tiempo: la flecha termodinámica, la flecha radiativa, la cosmológica, la cuántica, la causal y la biológica. ¿Son todas estas flechas una sola? El problema consiste en explicar cómo son posibles procesos irreversibles cuando las leyes de la física son invariantes frente a reflexión en el tiempo. Un posible avance podría darse si se encontrara un operador cuántico del tiempo, lo que resolvería la incompatibilidad de la física cuántica y la gravitatoria.

Se presenta en el [Capítulo 4](#) el principio de relatividad: las leyes de la física son las mismas si se observan en un sistema inercial  $S$  o en otro  $S'$  que se mueve con una velocidad constante con respecto a  $S$ , y que por tanto es también inercial. Por otra parte, la velocidad de propagación de la información no puede ser infinita y, por consiguiente, existe una velocidad máxima, que llamaremos  $c$ , y que es la misma en todos los sistemas inerciales. Esto es así, pues la existencia de  $c$  es una ley de la física y el principio de relatividad exige entonces su constancia. Como la máxima velocidad que se haya medido es la de la luz, obtenemos la (en apariencia) contradictoria afirmación: la velocidad de la luz vale  $c$  en cualquier sistema inercial. El principio de relatividad implica entonces que el espacio y el tiempo deben ser tratados por igual. Vemos así que la ecuación de Schrödinger no obedece el principio de relatividad y han de buscarse ecuaciones cuántico-relativistas, como la de Dirac o la de Klein-Gordon.

Los principios variacionales, que se discuten en el [Capítulo 5](#), son útiles en muchos aspectos de la física: en la mecánica newtoniana y la relativista, en el electromagnetismo y la óptica, así como en la mecánica cuántica y la teoría de campos. Estos principios reflejan el uso de superlativos, e implican que la integral de alguna función  $L$  típica del sistema tome, para la trayectoria que el sistema sigue, un valor mayor (o menor) que para cualquier otra trayectoria posible. De ahí se obtienen las ecuaciones diferenciales que deben obedecer las coordenadas del sistema. También usando el principio variacional se puede encontrar un método para resolver esas ecuaciones diferenciales de manera aproximada. Se presenta el método variacional de

Rayleigh-Ritz y se da un ejemplo específico.

Otro principio muy importante en la física, pues conduce a la teoría general de la relatividad, es el principio de equivalencia. En el [Capítulo 6](#) se discuten las diferencias entre masa inercial  $m_i$  y masa gravitacional  $m_g$  y, como manifestación de ese principio, se muestra que pueden escogerse de tal manera que  $m_i$  sea igual a  $m_g$ . Se describen luego las ideas que llevaron a Einstein a la teoría general de la relatividad, que es una teoría relativista de la gravedad. Según él, el espacio-tiempo se curva debido a la presencia de materia y energía y esa curvatura se manifiesta como un campo gravitacional. En un espacio curvo, las distancias dependen de un tensor métrico, cuyas componentes obedecen las ecuaciones de Einstein. Estas ecuaciones son altamente no lineales y por ello muy difíciles de resolver. En el caso de un campo gravitacional muy débil, estas ecuaciones se pueden linearizar. En esta aproximación, fue posible explicar el ligero corrimiento del perihelio de Mercurio. Se describen otras soluciones de las ecuaciones de Einstein. En todo caso, se hace notar que el principio de equivalencia es exclusivo de la fuerza gravitacional.

En el [Capítulo 7](#) se discuten las transformaciones de norma. Después de hacer un recuento de la dinámica lagrangiana y la electromagnética, se discute la invariancia bajo transformaciones de norma de las ecuaciones dinámicas cuánticas con el electromagnetismo incorporado. Se presenta también la deducción de las ecuaciones de Maxwell a partir de la invariancia de norma de las dinámicas cuántica y clásica, con lo cual se resalta una vez más la unidad en la física.

La [Parte II](#) del libro está dedicada a describir algunos ejemplos de fenómenos ondulatorios que aparecen en sistemas muy diferentes. Pocos temas son tan transversales en la física como las ondas, es decir, su presencia recorre nuestro entendimiento de la Naturaleza de un extremo a otro. No sólo aparecen en casi todas las áreas de la física clásica, son también parte medular de la mecánica cuántica y, recientemente, se demostró la predicción de Einstein sobre la existencia de ondas gravitacionales, como una consecuencia de la teoría de la relatividad. Lo más excitante es que lo que sabemos de las ondas aporta un marco general para entender diferentes fenómenos que van desde las escalas más pequeñas hasta las más grandes.

El [Capítulo 8](#) trata sobre el fenómeno universal de la resonancia que, como se explica, puede aparecer en elementos tan cotidianos como un vaso de vidrio, una pareja de mosquitos o un puente. Este fenómeno también es la base de muchos sistemas de detección, incluyendo varios instrumentos médicos, como la resonancia magnética nuclear. A través de ejemplos fasci-

nantes, el autor da una perspectiva amplia y variada de uno de los efectos más estudiados en la física.

El [Capítulo 9](#), por otra parte, trata de un fenómeno que normalmente se asocia sólo con la mecánica cuántica: el efecto túnel. Sin embargo, una vez que se reconoce que éste es una consecuencia del carácter ondulatorio de los sistemas cuánticos, no resulta sorprendente identificar su presencia en sistemas clásicos. Más aun, aprenderemos también cuál es su relación con un tema tan atractivo como la fotografía subacuática.

Mientras que la imagen de ondas que se propagan transportando energía y momento lineal nos resulta familiar al evocar las ondas en la superficie del agua o las ondas sísmicas, por ejemplo, es menos común pensar en ondas atrapadas. Este es el tema central del [Capítulo 10](#), que describe cómo se pueden confinar las ondas en una o dos dimensiones a través de guías que las conducen por trayectorias específicas, o incluso en las tres dimensiones espaciales, como sucede en el caso de los resonadores. Veremos que las aplicaciones de estos canales y trampas de ondas han revolucionado la tecnología de las telecomunicaciones —de hecho, vivimos inmersos en una gran guía de ondas— y han permitido el desarrollo de chips ópticos.

Y para dar un fascinante ejemplo de la ubicuidad de las ondas, el [Capítulo 11](#) describe aquellas que se pueden inducir como perturbaciones en una propiedad sutil de la materia a escala subatómica. Nos referimos a las ondas de espín, cuyo estudio forma parte de un tema mucho más amplio que ha florecido en las últimas décadas: la espintrónica. La presentación comienza con una breve reseña del origen de las propiedades magnéticas de los átomos y del papel que éstas juegan para definir, a escala macroscópica, distintos tipos de materiales. Esto a su vez determina, junto con la temperatura, la respuesta de la materia ante un campo magnético externo, que bajo ciertas condiciones puede dar lugar a las ondas de espín. El autor explica, a través de analogías, lo que ocurre cuando dichas ondas se propagan en medios periódicos estratificados, dando lugar a bandas “prohibidas” de frecuencia, como sucede en otros sistemas físicos y para otros tipos de ondas, como los cristales semiconductores o los cristales fotónicos o fonónicos.

Mientras los capítulos anteriores describen atractivos fenómenos que ocurren cuando las ondas viajan en un medio lineal, el [Capítulo 12](#) se ocupa de lo que pasa cuando lo hacen en un medio no lineal. En este caso se inducen efectos muy interesantes, como por ejemplo, que la velocidad de la onda dependa localmente de su amplitud. El resultado es que distintas porciones de un frente de onda viajan a velocidades diferentes, provocando una deformación “auto-inducida”. Por otro lado, hay efectos lineales como



la dispersión<sup>1</sup> o la difracción, que pueden compensar exactamente a los no lineales, deformando la onda en sentido opuesto. Cuando esto ocurre, se forman paquetes de ondas altamente localizados, ya sea en el espacio o en el tiempo, que se propagan sin sufrir distorsión. Debido a que dicho comportamiento recuerda al de una partícula, estas ondas solitarias se conocen también como solitones. Al igual que la mayoría de los fenómenos ondulatorios, éstos se presentan en escalas muy diversas, que van desde ondas de materia en un condensado de Bose-Einstein, hasta ondas en la superficie del océano. ¿Serán los tsunamis un ejemplo de solitones?

El [Capítulo 13](#), el último de la [Parte II](#), describe el nacimiento de lo que será sin duda una de las áreas más espectaculares de la ciencia moderna: la astronomía de ondas gravitacionales. La primera detección de las ondas gravitacionales en 2015, un siglo después de su predicción por Einstein, ha iniciado una nueva era científica. Fueron muchos los retos a superar para realizar la proeza de detectar e identificar estas perturbaciones del espacio-tiempo que se propagan a la velocidad de la luz y cuyas magnitudes son tan pequeñas que desafían incluso la imaginación. No sólo se requirieron los más sofisticados y costosos diseños experimentales y un desarrollo tecnológico monumental, sino que también fue necesario un catálogo de simulaciones que demandaron un esfuerzo teórico y computacional sin precedentes. Fue a través de la detección simultánea y de su comparación con las predicciones, que se logró encontrar, por fin, a las elusivas ondas gravitacionales. Una vez más, las ondas ocupan un lugar protagónico en la frontera de la ciencia.

Cabe mencionar, antes de seguir adelante con la descripción del contenido, que sería impreciso e injusto decir que nuestra incursión en el tema de las ondas se limita a la [Parte II](#) de este libro. Naturalmente, éste es también un tema central o subyacente en cualquier discusión sobre fenómenos cuánticos, como los que se abordan en la [Parte VI](#), cuyo contenido se describirá más adelante.

En la [Parte III](#) se discuten desde un punto de vista cualitativo algunos problemas de física clásica. En el [Capítulo 14](#), se presenta la historia de nuestro conocimiento sobre la refracción de la luz. Empieza en el siglo I, continúa en la época de oro de la ciencia en el Islam y luego se describe la controversia entre Fermat y Descartes sobre las leyes que rigen el paso de

---

<sup>1</sup>El término dispersión (traducción de la palabra en inglés: *dispersion*), en este contexto, se refiere al fenómeno de que la velocidad de una onda dependa de la frecuencia. En mecánica cuántica, por otra parte, es usual utilizar el término dispersión como una traducción de la palabra en inglés *scattering*, que es un fenómeno diferente.

la luz de un medio a otro. Al final, se conecta la discusión con los principios variacionales.

En los [Capítulos 15](#) y [16](#) se presentan dos problemas de la dinámica del cuerpo rígido: el trompo pesado muy rápido y el movimiento de esferas. En el primero se discuten las consecuencias de la conservación de la energía y de las componentes del momento angular a lo largo del eje del trompo y de la vertical: el trompo pesado precede y nuta, con una precesión más lenta y una nutación más pequeña mientras más rápido sea el trompo. En el segundo caso, se analiza “el efecto del efecto” en dos juegos y deportes. En el billar, éste ocurre cuando las bolas que giran chocan con las bandas y entre ellas. En el beisbol, se describen los complicados movimientos de una bola lanzada con efecto, que entonces curva su trayectoria, estableciéndose así una conexión entre la dinámica del cuerpo rígido y la mecánica de fluidos.

El problema clásico de muchos cuerpos se trata en el [Capítulo 17](#), donde se discute el que tal vez sea el problema más importante de la mecánica clásica: el Sistema Planetario. En la aproximación de planetas independientes, las simetrías del sistema físico nos permiten encontrar una solución exacta. Sin embargo, cuando los planetas interactúan, es necesario recurrir a técnicas numéricas complicadas. Por ejemplo, se usa la teoría de perturbaciones en física clásica, la cual, curiosamente, es menos conocida que la teoría de perturbaciones en mecánica cuántica.

Por otro lado, cuando el número de cuerpos que componen un sistema crece de manera excesiva, como los átomos de un gas en un volumen finito, resulta imposible —y en todo caso inútil— aplicar las herramientas de la mecánica clásica; entonces se hace necesario echar mano de la física estadística, que es uno de los temas centrales en la [Parte IV](#) del libro, junto con la termodinámica y las transiciones de fase.

La exposición comienza, en el [Capítulo 18](#), con una introducción histórica al desarrollo de la termodinámica y la formulación heurística de las leyes uno, dos y cero de la termodinámica, las cuales pueden prescindir de la naturaleza atómica de la materia. La tercera ley de la termodinámica, sin embargo, aunque fue formulada por Nernst sobre bases empíricas cimentadas en resultados experimentales al igual que sus predecesoras, requiere de la mecánica estadística para ser interpretada en su justa dimensión. Es en este sentido que el autor plantea la pregunta: “Las leyes de la termodinámica... ¿son cuatro?”, y nos da la respuesta a la luz de los conocimientos actuales.

En el [Capítulo 19](#), se hace un breve recuento histórico de lo que fue la confirmación definitiva de la hipótesis atómico-molecular y los funda-

mentos de la mecánica estadística. Se parte de las observaciones de Robert Brown, donde el autor propone incluso un experimento casero, para continuar con los desarrollos que Einstein y Smoluchowsky aportaron para explicarlas. El autor nos muestra como es posible obtener los mismos resultados para la descripción de un mismo sistema físico, un gas diluido, a partir de diferentes razonamientos: la termodinámica, la teoría cinética de los gases y la mecánica estadística; las dos primeras deterministas y la última probabilística.

El corazón de la termodinámica es el estudio de los mecanismos de intercambio de energía entre sistemas de diferente naturaleza; es una teoría que aporta descripciones de sistemas macroscópicos que alcanzan estados de equilibrio. Sin embargo, la mayoría de los procesos que ocurren en la Naturaleza involucran estados fuera de equilibrio y muchos de ellos son irreversibles. Esto ha llevado a extender los límites de la termodinámica clásica hacia una teoría más general, como explica el autor del [Capítulo 20](#) en un fascinante recorrido a través de la construcción histórica de la termodinámica actual, que busca comprender procesos fuera de equilibrio y fenómenos de transporte que aparecen en diversos sistemas físicos. En este contexto, la entropía, concepto propuesto por Clausius cuyo significado generó gran polémica entre la comunidad científica de la época, se erige como una noción fundamental para describir los fenómenos irreversibles.

¿Qué ocurre cuando la materia se somete a muy altas presiones, aquellas que naturalmente se pueden alcanzar, por ejemplo, en estrellas extremadamente densas o en algunos fenómenos geofísicos? La autora del [Capítulo 21](#) responde a esta pregunta, dando cuenta de los interesantes fenómenos que pueden ocurrir en estas condiciones. Las propiedades mecánicas y estructurales de la materia se alteran, los enlaces químicos cambian y todo esto puede llevar a comprender mejor la estructura misma de la materia, o incluso a la síntesis de nuevos materiales. Pero, ¿es posible obtener estos niveles de presión en un laboratorio?

De hecho, lo que le puede suceder a un sistema cuando cambian las condiciones externas, como presión y/o temperatura, es lo que conocemos como una transición de fase, que es otro tema ubicuo en la Física, como se puede apreciar en el [Capítulo 22](#). En una nítida exposición, el autor nos lleva desde ejemplos muy cotidianos, pasando por una revisión de conceptos termodinámicos, hasta temas de gran actualidad, que han dado lugar a varios premios Nobel: las fases cuánticas y las fases topológicas. Veremos que las fases corresponden a comportamientos colectivos de los componentes de un “sistema complejo”, que es la materia, y que las transiciones de fa-

se son resultado de una competencia entre orden y desorden, que ocurren para una combinación específica de parámetros externos. Hasta mediados del siglo pasado, las transiciones de fase se clasificaban en términos de las simetrías que rompían, pero este paradigma se derrumbó al encontrar que hay transiciones que no implican un rompimiento de simetría.

Y cuando hablamos de transiciones de fase, usualmente nos referimos al estado inicial y al estado final de un sistema, pero cabe preguntarse, ¿qué pasa en esos estados críticos en que dos o más fases subsisten? Por ejemplo, cuando el agua alcanza una temperatura de 0 °C a una presión de 1 atm ¿de inmediato se congela? Estas interesantes preguntas son las que plantea el [Capítulo 23](#) para llevarnos a comprender lo que es un estado metaestable; aquel que ocurre en la ruta al equilibrio a través de una transición de fase, o en una reacción química, o en la acumulación de esfuerzos mecánicos que desencadenan un terremoto y que, a pesar de no ser estados de mínima energía, pueden persistir por un tiempo que resulta impredecible. Lo sorprendente es que estos estados, que aparecen en sistemas tan disímiles, se pueden entender mejor estableciendo una analogía con un sistema dinámico sencillo, constituido por una partícula browniana, es decir, una partícula sometida a una fuerza estocástica, en un potencial con dos puntos de equilibrio estable y uno inestable que los separa. Más aún, como veremos, este sistema se puede recrear experimentalmente utilizando pinzas ópticas.

La [Parte IV](#) del libro cierra con broche de oro con el [Capítulo 24](#). Resulta muy difícil ubicar esta esclarecedora exposición en una de las ocho casillas en que hemos dividido este libro, ya que establece conexiones entre varias de ellas, por ejemplo, ondas, mecánica clásica, sistemas complejos y física cuántica, para mostrar la universalidad de un comportamiento estadístico. El autor nos lleva, a través de diversos ejemplos de sistemas físicos (¡cuyas dimensiones abarcan 14 órdenes de magnitud!), a comprender la necesidad de adoptar un enfoque estadístico al describir fenómenos complejos. Esto permite interpretar y describir el comportamiento del sistema en términos de unas pocas cantidades físicamente relevantes, en lugar de perderse en los detalles. Es así que este capítulo sintetiza los aspectos más sobresalientes de la física estadística, pero también resulta una introducción ideal para la siguiente parte del libro.

La [Parte V](#) la hemos titulado “Caos y sistemas complejos”. Aunque varias nociones relacionadas con estos temas ya han sido introducidas en capítulos anteriores, aquí agrupamos tres contribuciones que tienen como eje principal la emergencia de “la complejidad”. Se comienza con el [Capítu-](#)

lo 25, donde se expone el concepto del caos dinámico y se identifican los aspectos que son su firma inequívoca. El punto de partida es un ejemplo sencillo del problema de tres cuerpos, que en el caso general es un sistema insoluble de la mecánica clásica descrito por un conjunto de ecuaciones diferenciales. A continuación se construye un sorprendente vínculo con sistemas dinámicos discretos, que se describen por mapeos de iteración muy simples. El autor demuestra la equivalencia de ambos comportamientos dinámicos, para concluir que es prácticamente imposible conocer el destino de estos sistemas a tiempos largos. Todo esto lleva a revisar los conceptos de predictibilidad, determinismo y fenómeno azaroso. Es decir, puede haber sistemas deterministas que se tornan impredecibles a largo plazo. Así, a través de una fascinante ruta de asociaciones insospechadas, podemos entender el surgimiento del caos dinámico en un área que se consideraba agotada: la mecánica clásica.

Los Capítulos 26 y 27 tienen en común lo que se denomina “sistemas complejos”. En particular, el Capítulo 26 trata los conceptos de emergencia y autoorganización como resultado de la dinámica no lineal y la termodinámica fuera de equilibrio. La emergencia se distingue por la aparición de un nuevo orden espacio-temporal en donde previamente no existía. La Naturaleza se autoorganiza formando nuevas estructuras. Pero algo de lo que el autor resalta en este capítulo es que, buscando propiedades genéricas y comportamientos dinámicos en común, se ha encontrado que la autoorganización emerge desde el origen del Universo y de la materia viva, hasta en sistemas tan dispares como los lenguajes, las reacciones químicas o la aritmética.

¿Cómo se forman los patrones multicolores en los peces o en las alas de las mariposas? Esto es también materia de estudio de los sistemas complejos y se aborda en el Capítulo 27. Su autor nos muestra cómo se ha tendido un puente de colaboración entre la física y la biología, que ha sido de enorme beneficio para ambas disciplinas. Mientras la biología ha encontrado bases formales y sustento en modelos matemáticos, la física ha tenido grandes avances en la descripción de sistemas biológicos, que son inherentemente complejos, tomando como base conceptos físicos elementales. Pero esta venturosa relación va aún más lejos; al desdibujar las fronteras entre estas dos disciplinas, se está dando lugar a la construcción de una nueva ciencia, que seguramente impactará sustancialmente en nuestro entendimiento de la Naturaleza.

Para continuar nuestro recorrido por la física, nos adentramos a la mecánica cuántica, y tratamos varios de sus aspectos en la Parte VI del libro.

En la física clásica, los conceptos de partícula y de onda parecen ser excluyentes. En particular, los fenómenos de difracción e interferencia se asocian sólo a sistemas ondulatorios. Es por ello que no deja de sorprender que las partículas elementales exhiban también estos fenómenos. En el [Capítulo 28](#), se presenta un poco de la historia de estas ideas hasta llegar a la tesis doctoral de Louis de Broglie, que da inicio a la mecánica ondulatoria de las partículas. Se presenta la ecuación de Schrödinger y la autora se pregunta ¿qué nos dice la función de onda? Finalmente, se analiza si es posible que existan al nivel macroscópico sistemas clásicos de corpúsculos acompañados de ondas, análogos a los sistemas cuánticos. Esto lleva a la autora a presentarnos una variedad de experimentos sorprendentes, como las gotas caminantes que rebotan sobre un fluido vibrante.

Cuando se consideran muchas partículas idénticas, las consecuencias son diferentes en los casos clásico y cuántico. En el primero, las podemos distinguir porque conocemos su trayectoria, pero en el segundo, el principio de incertidumbre de Heisenberg induce el principio de indistinguibilidad, que tiene consecuencias asombrosas en el comportamiento de esos sistemas en la Naturaleza. En el [Capítulo 29](#) de esta primera parte se discute la diferencia entre partículas fermiónicas, con funciones de onda antisimétricas que cambian su signo cuando se intercambian dos partículas, y los bosones que no lo hacen. Estas diferencias se hacen más notables cerca del cero absoluto. Fenómenos como la superfluidez y la superconductividad han podido explicarse con estos conceptos.

La física clásica es sin duda la que domina en nuestro contacto cotidiano con la Naturaleza, de modo que el concepto de partícula, como un objeto que se comporta de acuerdo a las leyes de Newton, por ejemplo, nos parece familiar. Sin embargo, en el [Capítulo 30](#) se discute un concepto que resulta ajeno para la mayoría: las cuasipartículas, sobre las que el propio autor pregunta desde el título ¿son reales? Estos entes, en apariencia exóticos, emergen a partir de un comportamiento colectivo de las partículas que componen a un sistema, pero a diferencia de estas últimas, las cuasipartículas no se encuentran espacialmente localizadas y, aún así, pueden interactuar entre ellas y también con las partículas. ¿Qué son entonces estos sujetos? Las claves para entenderlas están en la mecánica cuántica y en un comportamiento ondulatorio con modos cuantizados, y las evidencias de su existencia son tan reales que la pregunta es más bien: ¿será que es nuestra percepción del mundo la que nos dificulta entenderlas como algo real?

En el [Capítulo 31](#), se analiza críticamente el teorema de Ehrenfest, con-

siderado como un límite en el que las ecuaciones de movimiento cuánticas convergen con las clásicas. Para comparar las predicciones clásicas con las cuánticas es necesario obtener de la ecuación de Schrödinger relaciones entre valores esperados de las coordenadas espaciales y de los momentos, que recuerden a las ecuaciones de Hamilton para una partícula de masa  $m$  sujeta a una fuerza  $F$ . Pero esto requiere que el valor medio de la fuerza en  $x$  sea igual a la fuerza evaluada en el valor medio de  $x$ , lo cual sería cierto si la distribución espacial fuera altamente localizada. Sin embargo, las soluciones de la ecuación de Schrödinger se ensanchan con el tiempo. Surge entonces, según la autora, la posibilidad de que la función de onda no represente una partícula sino un ensamble de ellas. En todo caso, parece ser que la mecánica cuántica nos desafía una vez más.

Se ataca en el [Capítulo 32](#) un problema en extremo complicado: la interpretación de la mecánica cuántica. El autor inicia haciendo ver que las leyes físicas clásicas viven en un mundo aparte de las cuánticas: las clásicas en el mundo de funciones en el espacio tiempo y las cuánticas en un universo de operadores que actúan en el espacio de Hilbert. Describe después el trabajo de Bohm, que busca que la teoría cuántica tenga un carácter causal y determinista. Estas ideas fueron rechazadas por los adeptos a la Escuela de Copenhague, que es la interpretación ortodoxa de la mecánica cuántica. Aunque se acepta que el aparato formal de la teoría es satisfactorio, la interpretación física no es común a todos los científicos, y hay investigadores que proponen una variante teórica más satisfactoria. Al menos una veintena de teorías alternas, no todas consistentes entre sí, han sido propuestas. Ello refleja la terrible frase de Richard Feynman: *Nobody understands quantum theory*. Se presentan dos de estas teorías, la que propone un mundo subcuántico clásico de autómatas celulares y la electrodinámica estocástica. De todas formas, no es de esperarse un cambio esencial en la interpretación de la mecánica cuántica en un plazo breve.

En el [Capítulo 33](#) se busca aclarar el concepto de enredamiento cuántico en sistemas compuestos. Se habla en particular de procesos no clásicos en óptica no lineal, donde se generan ondas con frecuencias diferentes a las que inciden. Por ejemplo, el momento dipolar puede ser una función no lineal del campo eléctrico. Aunque existen procesos de óptica no lineal clásicos, que pueden ser descritos por las ecuaciones de Maxwell, en este capítulo se describen los que son de origen cuántico. Una de las propiedades más interesantes de los sistemas cuánticos formados por varios subsistemas es la aparición del enredamiento cuántico, que ha generado mucho interés después del famoso artículo EPR (escrito por Einstein, Podolsky y Rosen)

publicado en 1935. El sistema es enredado si sus estados no son el producto directo de estados que describan a cada uno de los subsistemas. Se discuten algunos desarrollos, como la computación cuántica, que aprovechan estas propiedades.

Si un sistema está formado por subsistemas que tienen propiedades no independientes, se dice que los subsistemas están correlacionados, correlaciones que pueden ser clásicas o cuánticas. Un ejemplo de estas últimas es el principio de exclusión de Pauli, o la llamada discordia cuántica, que se describe en el [Capítulo 34](#). Se discute el fenómeno de decoherencia que impide observar las correlaciones cuánticas. A continuación, los simuladores cuánticos son analizados y se ve que las correlaciones cuánticas se convierten entonces en herramientas informáticas de mucha importancia, con aplicaciones incluso en otras disciplinas; la biología, por ejemplo.

Una de las manifestaciones físicas más simples del vacío cuántico son las fuerzas de Casimir, asociadas a la distorsión de la densidad espectral del vacío por placas conductoras. En el [Capítulo 35](#) se hace ver que muchos fenómenos se deben a las fluctuaciones cuánticas del vacío. Entre ellas, las fuerzas intermoleculares de Van der Waals pueden originarse de interacciones dipolares fluctuantes del átomo y que puedan ser resultantes a su vez de las fluctuaciones del vacío. También pueden deberse a éstas la emisión atómica espontánea o la radiación de fondo de 2.7 K del Universo. Incluso se especula que el campo de punto cero podría ser una gran componente o hasta la totalidad de la energía oscura. En estos temas existen todavía muchas preguntas por contestar.

¿Es posible encontrar un sistema macroscópico compuesto por una gran cantidad de partículas que, en alguna condición especial, se pueda describir por un único estado cuántico? Se discute en el [Capítulo 36](#) el caso de un gas diluido, sistema macroscópico enteramente clásico, pero que contiene toda la física para responder a la pregunta anterior. Esto es así ya que es posible encontrar una temperatura por debajo de la cual se manifieste la naturaleza cuántica del sistema. Lo anterior ocurre cuando la longitud de onda de De Broglie es comparable a la distancia entre los átomos que forman el sistema. En tal caso, muchos paquetes de onda interfieren constructivamente y dan origen a una única onda macroscópica de materia. En otros términos, el estado base se ocupa en forma macroscópica, y emerge la condensación de Bose-Einstein. Vemos entonces que la respuesta a la pregunta que da título a este capítulo es afirmativa y las posibilidades que ofrece este estado de la materia nos abren una nueva ventana para explorar el mundo de fenómenos cuánticos.



Para entender las transiciones de fase en el régimen cuántico, como lo que ocurre con la superconductividad y la superfluidez, se utilizan sistemas análogos, en particular los gases atómicos ultrafríos. En el [Capítulo 37](#), se definen en primer lugar la transición de fase y sus propiedades. En particular, se señala que sistemas de muy diversa naturaleza presentan comportamientos semejantes cerca de una transición de fase. Se muestra después cómo, usando campos externos, se puede lograr que los átomos ultrafríos se muevan en forma análoga a los electrones en la materia. Luego de recorrer brevemente la historia y llegar hasta los superconductores de alta temperatura, se ve que los átomos ultrafríos, también superfluidos, tal vez permitan entender esta última fase de la materia tanto desde el punto de vista teórico como del experimental.

El espectro de energía en un sistema cuántico puede constar de cuatro tipos de estados: los estados ligados confinados que muestran un espectro discreto; en el continuo, tenemos estados extendidos, estados resonantes y los que se discuten en el [Capítulo 38](#), estados ligados en el continuo, que denotaremos como BIC por sus siglas en inglés (*Bound states In the Continuum*). Los primeros en construir un estado BIC fueron von Neumann y Wigner, dos insignes físicos húngaros, quienes lo lograron en 1929. Los BIC se pueden construir también con sistemas que tengan simetría PT. Usando la transformación de Darboux, que se define en este capítulo, se muestra cómo lograr estos estados, y se presentan análogos en óptica y acústica.

La [Parte VII](#) del libro también trata sobre mecánica cuántica, ahora aplicada al estudio de algunos sistemas materiales específicos: átomos, moléculas y cúmulos de átomos que adquieren personalidad propia. Hoy en día, desde pequeños aceptamos con naturalidad que la materia está compuesta por átomos. Sin embargo, llegar a esta conclusión fue un proceso que tomó siglos y que involucró el esfuerzo de muchas mentes brillantes. Los [Capítulos 39](#) y [40](#) nos narran, de una forma amena y con un estilo muy personal del autor, la construcción histórica de la teoría atómica desde los puntos de vista de químicos y físicos, respectivamente. Mientras los primeros se enfocaron en reunir evidencia hasta probar de manera inequívoca que átomos y moléculas son los constituyentes de la materia que vemos a nuestro alrededor, los físicos centraron su atención en averiguar de qué están hechos los átomos, como sistemas aislados, y como se organizan los componentes subatómicos. Se trata, desde luego, de la química cuántica y la mecánica cuántica desde su nacimiento hasta su estado actual, ambas crónicas sazonadas por la visión crítica del autor sobre puntos que considera controversiales. El [Capítulo 39](#) finaliza con una breve reflexión, no sólo sobre

los retos más importantes que prevalecen en la química cuántica, sino sobre el rumbo del avance científico y su papel en la sociedad. Por otra parte, el [Capítulo 40](#) señala que la teoría del átomo es por el momento aproximada e incompleta, por lo que aún hay mucho por hacer en este terreno. Al final, serán los cálculos cada vez más precisos y su comparación con las medidas experimentales más refinadas, lo que vaya dando las pautas sobre cómo debemos enriquecer las teorías existentes e ir construyendo las bases para teorías en desarrollo, como la Mecánica Cuántica Relativista.

Mientras nuestra comprensión de las propiedades de átomos aislados y de sistemas macroscópicos constituidos por un número muy grande de átomos ha tenido avances significativos y hoy en día contamos con métodos bien establecidos para su estudio, los sistemas formados por unos pocos átomos han dado lugar a un área científica totalmente novedosa en las últimas décadas. Se trata de la nanociencia, de lo cual el autor del [Capítulo 41](#) nos brinda un panorama general, que abarca desde entender qué es lo que hace diferentes a estos sistemas, cómo se sintetizan en el laboratorio, cuáles son las herramientas teóricas para su estudio, algunas de sus propiedades más novedosas y llega hasta las aplicaciones, que ya entran en el terreno de lo que llamamos nanotecnología. Y es muy significativo que esta nueva área, que se encuentra en construcción, se llame *nanociencia*, puesto que su relevancia no se limita al ámbito de la física, sino que también es de interés para la química, la biología, la medicina, la ciencia de materiales y su alcance en aplicaciones tecnológicas va en aumento.

Finalmente, en la [Parte VIII](#) de este libro se abordan algunos de los aspectos principales de la física de altas energías. Empezamos por presentar los aceleradores de partículas, que han sido básicos para medir muchas de las propiedades de estos entes del mundo microscópico. En el [Capítulo 42](#), se hace un viaje en el tiempo para ilustrar el surgimiento y el desarrollo de los aceleradores, como uno de los instrumentos más importantes en la ciencia y la tecnología. El viaje inicia en el Siglo XIX con la invención de los tubos de rayos catódicos, que llevaron al descubrimiento de los rayos X, y después de un detallado recorrido llega a lo que ocurrió en la segunda mitad del Siglo XX cuando se propone el sincrotrón, un nuevo tipo de acelerador. En particular, cuando se aceleran electrones se produce una fuente de luz muy intensa, la cual tiene una enorme cantidad de aplicaciones. Por ello hoy existen en el mundo más de 50 sincrotrones de electrones que han traído grandes desarrollos científicos y tecnológicos. Es también por este motivo, que el autor termina planteando la necesidad de que México ingrese al campo de los aceleradores, específicamente, de los generadores de luz

muy intensa.

En el régimen cuántico, las propiedades electromagnéticas de las partículas elementales y los procesos radiativos nos dan un marco ideal para poner a prueba nuestro entendimiento del Universo, como expone el autor del [Capítulo 43](#). Después de una breve reseña de las propiedades de la radiación multipolar clásica, discute cómo extender esta estructura a la radiación cuántica. Mientras la amplitud de probabilidad radiativa para los multipolos de orden más bajo se puede obtener del proceso no radiativo, la conservación de la carga en electrodinámica cuántica conlleva una propiedad de simetría de norma. Esto implica que los multipolos de orden superior requieren de un modelo de estructura interna para el objeto que radia. Así, el autor muestra mediante algunos ejemplos como el estudio de los procesos radiativos pone a prueba dichos modelos y, donde se encuentran discrepancias entre predicciones teóricas y mediciones realizadas con gran precisión, puede haber aún muchas sorpresas para la física fundamental.

La electrodinámica cuántica (QED por sus siglas en inglés) combina la relatividad con la mecánica cuántica para describir las interacciones electromagnéticas entre las partículas más fundamentales de la materia. En el [Capítulo 44](#) se presenta algo inesperado, pues un sistema como el grafeno exhibe fenómenos análogos a los tratados en la QED, gracias a que puede ser descrito por una ecuación de Dirac. Así, se discuten una serie de analogías extraordinarias con las que el grafeno ha permitido comprobar experimentalmente efectos cuántico relativistas, de otro modo inaccesibles. Esto es sorprendente porque el grafeno es una estructura bidimensional formada por una monocapa de átomos de carbono, y uno esperaría que no tuviera las extrañas propiedades físicas que posee y que pueden dar lugar a importantes desarrollos tecnológicos.

El [Capítulo 45](#) es, con justa razón, el capítulo más extenso del libro, ya que da una idea unificada de muchos aspectos de la teoría de campos cuántica y discute el papel del principio de invariancia de norma en su formulación. Resulta muy interesante la historia de cómo se fueron descubriendo las sucesivas generaciones de partículas elementales. Al avanzar en la construcción del modelo unificado electrodébil y de la cromodinámica cuántica, la consistencia de la teoría y la búsqueda de simetrías hacía necesario incluir nuevos grados de libertad, es decir, nuevas propiedades de los componentes que consideramos elementales de la materia. La teoría de norma de Yang-Mills se encuentra en el corazón de esta búsqueda y ha sido, por tanto, uno de los cimientos del modelo estándar. Todo este proceso llevó a una gran cantidad de premios Nobel a sus protagonistas, tanto por las pre-

dicciones de nuevas partículas, como por su eventual detección. ¿Y ahora qué sigue en este proceso de búsqueda?

Terminamos este viaje por varios lugares que ha visitado la física actual, justamente echando una mirada a lo que podría ocurrir en un futuro no muy lejano. Como se expone en el [Capítulo 46](#), el modelo estándar (ME) es muy exitoso para describir las partículas elementales y las interacciones entre ellas, en lo que se conoce como el límite de bajas energías o escala electrodébil ( $\sim 100$  GeV). Deja, sin embargo, muchas preguntas sin resolver y debemos buscar una teoría más fundamental, cuyo límite de baja energía sea el ME. Añadir simetrías, partículas, interacciones o dimensiones espacio-temporales extra son las principales rutas por las que se ha buscado formular esta teoría. En este capítulo final se presenta un breve panorama de los varios intentos que siguen en desarrollo, ofreciendo terreno fértil para nuevas generaciones de físicos.

# I

## ALGUNOS PRINCIPIOS GENERALES



## SIMETRÍAS CLARAS Y OCULTAS

*Germinal Cocho Gil\**

La primera discusión sobre el concepto de espacio la tenemos con los filósofos presocráticos, que buscaban causas “terrestres” y no divinas para las cosas. En el Renacimiento, en física, surgieron las figuras de Galileo y Newton, para quien espacio y tiempo son absolutos e independientes entre sí. Esta concepción cambia con la relatividad general de Einstein; espacio y tiempo ya no son absolutos y las trayectorias dejan de ser rectilíneas y con velocidad constante, debido a que el espacio está deformado por la presencia de otros cuerpos. Un objeto en movimiento sigue la trayectoria más corta o geodésica en ese espacio curvado. En la física cuántica, por otra parte, el vacío, el espacio, es en realidad un “lleno fluctuante”, en el que un conjunto de operadores matemáticos pueden transformar partículas virtuales en reales. El teorema de Noether nos dice que a cada simetría le corresponde una ley de conservación y viceversa. Se pueden considerar dos casos de rotura de simetría: la explícita y la espontánea. La segunda es responsable, por ejemplo, de las transiciones de fases de la materia, así como de las fases topológicas. Esto se encuentra en el corazón de la descripción de los sistemas complejos y, en este contexto, podemos preguntarnos qué ocurre con la simetría e invariancia en los organismos biológicos.

### SIMETRÍAS Y CANTIDADES CONSERVADAS

Es en la Grecia presocrática (alrededor de 500 años antes de la era cristiana) que filósofos griegos se plantean el saber el origen de las cosas, del Universo, buscando repuestas “naturales” y no teológicas. Entre estos filósofos podemos citar a Parménides de Elea, para el cual no existía el No-Ser,

---

\*Departamento de Sistemas Complejos, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México. 1 de mayo de 1933 – 9 de mayo de 2019.

la nada, el vacío, y solo existía un lleno infinito, homogéneo e inmutable. En sus palabras:

“Voy a decírtelo ahora mismo, la única cosa que se ofrece al pensamiento, aquella que afirma que el Ser es y el No-Ser no es”... “porque no podrías jamás llegar a conocer el No-Ser —cosa imposible— y ni siquiera expresarlo en palabras”.

Otro filósofo presocrático es Demócrito de Abdera, que nos dice:

“Nada existe aparte de los átomos y el vacío”... “estos átomos se mueven en el vacío infinito, separados unos de otros y diferentes entre sí en figuras, tamaños, posición y orden; al sorprenderse unos a otros colisionan y algunos son expulsados mediante sacudidas al azar en cualquier dirección, mientras que otros entrelazándose mutuamente en consonancia con la congruencia de sus figuras, tamaños, posiciones y ordenamientos se mantienen unidos y así originan el nacimiento de cuerpos compuestos”.

Otro de estos filósofos es Heráclito de Efeso que en sus propias palabras nos dice:

“Este mundo, el mismo para todos, no lo hizo ninguno de los dioses ni de los hombres, sino que ha sido eternamente y es y será un fuego eternamente viviente, que se enciende según medidas y se apaga según medidas”.

“No puedes embarcarte dos veces en el mismo río, pues nuevas aguas corren tras de las aguas”.

“Hemos de saber que la guerra es común a todos y que la lucha es justicia y que todo nace y muere por obra de la lucha”.

Se puede decir que la ciencia “propriadamente dicha” se originó en la Grecia clásica, y en particular, la física con Aristóteles, que fue figura dominante en su época y durante la Edad Media europea.

Aristóteles, el filósofo del sentido común, era hijo de médicos y su ciencia era “biologista”, en que el modelo básico de los fenómenos era el de los organismos vivos, con su “motor interno”. Esto a diferencia de los entes inanimados en que su movimiento sería debido a fuerzas, motores externos y cuando no se conocían las causas, fuentes de su movimiento, se atribuía a motores internos.

Otro aspecto de la ciencia aristotélica es lo referente a las causas. El consideraba cuatro causas del cambio: a) la causa material, “aquello a partir de lo cual una cosa llega a ser lo que es, por ejemplo el bronce es la causa de la estatua”, b) la causa formal, “la forma o el patrón de una cosa”, c) la causa eficiente, “aquello a partir de lo cual comienza el cambio o cesa el cambio” y d) la causa final, “aquello para cuya consecución es una cosa”. Desde la revolución científica con Galileo y Newton como figuras fundamentales, la



riqueza del concepto de causa de Aristóteles se ha visto reducida drásticamente y la física clásica considera solo la causa eficiente, con la relación local de causa-efecto, descrita de ser posible por ecuaciones integro-diferenciales. Lo que los filósofos de la ciencia llaman *vera causa*, de lo cual la gravitación universal de Newton es buen ejemplo. Otra contribución fundamental de Newton es lo referente a sus tres leyes de la dinámica y en particular su segunda ley: “la fuerza es igual a la masa por la aceleración”. Asociado a esta ley, Newton supone que el tiempo transcurre de modo invariable en cualquier sistema de referencia y que el espacio es homogéneo, “liso”, e isótropo, igual en cualquier dirección que se mire. Para Newton espacio y tiempo son absolutos y espacio, tiempo y materia son independientes entre sí. Esto cambiará en la física contemporánea.

A mediados del siglo XIX, en biología con Darwin, se enfatiza que tanto o más importante que las *veras causas*, sencillas y universales, son las condiciones iniciales y las contingencias históricas, el medio externo de la selección natural de Darwin. En el siglo XX con el caos determinista y la dinámica de los sistemas complejos se muestra que lo contingente puede ser importante para los sistemas físicos, como es el caso para la meteorología, para la dinámica del clima. De hecho, una característica de los sistemas complejos es la importancia de lo contingente. Además, para la física actual el espacio no es algo liso e inmutable, tiene las características de un medio material deformable en la relatividad general, la teoría de la gravitación de Einstein, y es un “lleno bailarín” para la física cuántica. Además, en la relatividad general espacio, tiempo y materia están dinámicamente interrelacionados y no son independientes el uno del otro como en la física newtoniana.

Son aspectos importantes de la física lo referente a lo común, lo que es igual, en los objetos y sistemas físicos (como la homogeneidad e isotropía del espacio) y a la presencia de cantidades conservadas, invariantes. Se ha preguntado si existe alguna relación entre ambos y se ha encontrado que si la hay, que la conservación de la energía estaría asociada a la homogeneidad del tiempo, que la conservación del momento lineal lo estaría a la homogeneidad del espacio y la conservación del momento angular lo estaría a la isotropía espacial. Se asocia cierta invariancia formal de las ecuaciones electromagnéticas a la conservación de la carga eléctrica.

Cabe preguntarse qué sucede cuando los sistemas no son homogéneos, invariantes, globalmente, pero lo son en vecindades pequeñas, pudiendo diferir de una vecindad a otra, y se puede mostrar que esta invariancia local implica ecuaciones de movimiento para nuevos campos (como es el caso

para las ecuaciones de Maxwell y el campo electromagnético). Asociado a esta invariancia, invariancia de norma, se pueden derivar la dinámica de diversas fuerzas físicas como las del electromagnetismo y fuerzas nucleares fuerte y débil. Tenemos pues que los aspectos de simetría y cantidades conservadas son muy importantes en la física clásica y contemporánea

### Espacio-tiempo

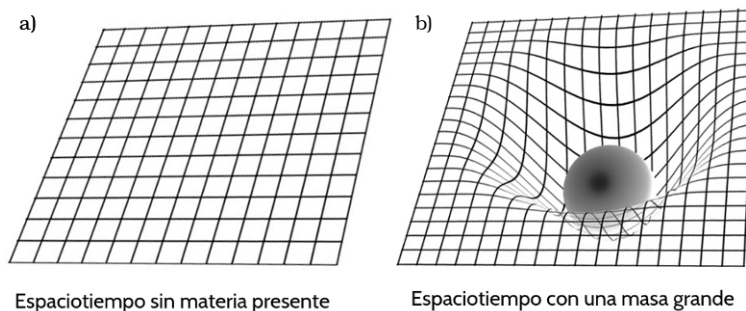
En tiempos de la Grecia clásica, la primera discusión sobre el concepto de espacio la tenemos con los filósofos presocráticos, alrededor de 500 años a. C. Estos filósofos no estaban interesados en los dioses del Olimpo, sino que se preguntaban de qué estaban hechas las cosas y por qué funcionaban, por decirlo así buscaban causas “terrestres” y no divinas. Para Parménides, no existe el vacío, la nada, y el Universo sería un lleno inmutable, que no cambia. Sería como un cuerpo esférico homogéneo y de tamaño infinito. Para Heráclito, el Universo sería un lleno, no existiría el vacío, la nada, pero estaría en un cambio continuo, como el fuego. Lo que existe sería el resultado de fuerzas contrarias que se equilibran. Algo así como un sistema físico en el punto crítico. Para Demócrito, existiría la nada y en esta nada tendríamos una multitud de cuerpos homogéneos e inmutables de formas y tamaños diversos. De “átomos”. Podríamos decir que Heráclito fue precursor de la física estadística y Demócrito padre de la física atómica. Pasa el tiempo, y en el siglo III a. C. tenemos la gran figura de Aristóteles, sabio universal, quizás el mayor biólogo que haya existido, para el cual no existiría la nada, el vacío, sino que se tendría un “lleno dinámico”. Para Aristóteles el mundo es denso, su universo es una plétora sobrecargada, como un cuadro cubista de objetos entrelazados y estrechamente superpuestos. Porque todo debe encontrar un lugar, sin dejar huecos. Todo cuerpo estaría estrechamente rodeado de otros cuerpos. El movimiento tendría lugar por un proceso de reptación, algo similar al enroque en el ajedrez o a como sale uno del metro cuando está lleno y uno está lejos de la puerta, sale uno reptando como las serpientes.

Los cuadros cubistas plantean la unidad de la forma. En la misma imagen se unen el ser real y el recuerdo de la imagen que su presencia evoca. Cada cosa es reproducida con formas en las que coinciden al mismo tiempo y diversos ángulos de visión: desde el frente, desde lo alto desde los escorzos más oblicuos, y todo en la misma imagen.

Durante la Edad Media europea domina una mezcla del pensamiento cristiano y del aristotélico y llegamos eventualmente al Renacimiento y en física a las figuras de Galileo y Newton. Como veíamos, para Newton el

espacio era una arena lisa, inmutable, homogénea e isotrópica y el tiempo transcurriría de modo igual en cualquier sitio y para cualquier sistema de referencia. Los cuerpos en este espacio se moverían con velocidad y dirección constantes y cuando no hiciesen así se debería a la presencia de fuerzas y su movimiento estaría dada por su segunda ley de la dinámica: Fuerza igual a masa por aceleración. Sería un sistema predictivo en que conociendo las masas y las fuerzas e integrando las ecuaciones encontraríamos la trayectoria.

Con la relatividad general de Einstein, su teoría de la gravitación, el espacio y el tiempo ya no son absolutos e inmutables en que los cuerpos siguen trayectorias diversas debido a la acción de fuerzas, se supone que no existen fuerzas gravitacionales y que las trayectorias dejan de ser rectilíneas y con velocidad constante debido a que el espacio está deformado por la presencia de otros cuerpos y que estos siguen la trayectoria más corta, geodésica, en ese espacio curvado.



**Figura 1.1:** Espacio bidimensional en ausencia (a) y presencia (b) de un cuerpo que deforma el espacio.

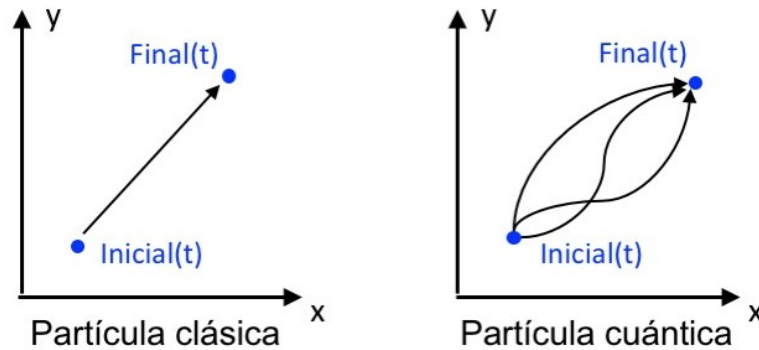
Pasa el tiempo y en la física cuántica, el vacío, el espacio, vuelve a ser un “lleno bailarín” en que se tiene como con Aristóteles todo tipo de cuerpos, “en potencia”, fluctuando como el fuego heracliteano y en que un conjunto de operadores matemáticos pueden transformar estas partículas y cuerpos virtuales en reales. Este vacío recuerda de nuevo a los cuadros cubistas.

En la física cuántica, en el enfoque de Feynman, las partículas siguen todas las trayectorias posibles y se tienen los postulados:

1. La probabilidad de un evento está dada por el módulo al cuadrado de un número complejo llamado “amplitud de probabilidad”.
2. Esta amplitud de probabilidad está dada añadiendo juntas las contri-

buciones de todas las trayectorias en espacio de configuración.

3. La contribución de una trayectoria es proporcional a  $\exp\{(2\pi S/h)\}$ , donde  $S$  es la acción dada por la integral sobre el tiempo del Lagrangiano a lo largo de la trayectoria y  $h$  es la constante de Planck.



**Figura 1.2:** El enfoque de Feynman para la mecánica cuántica. Una partícula cuántica podría seguir cualquier trayectoria con una probabilidad dada por la integral de la acción a lo largo de dicha trayectoria. La trayectoria clásica estaría dada por la suma de las integrales de la acción de las diferentes trayectorias. Las trayectorias van desde el punto espacio temporal  $(x_a, t_a)$  al punto  $(x_b, t_b)$ .

#### ROTURA DE LA SIMETRÍA

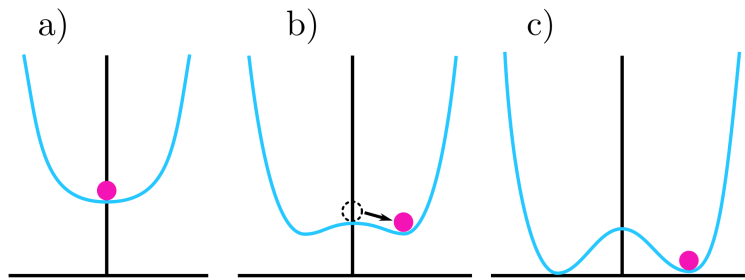
Se pueden considerar dos casos, la rotura explícita de la simetría y la rotura espontánea.

Rotura explícita de la simetría. Se debe ésta a la presencia de términos no simétricos en la ecuación de movimiento debido a que el Lagrangiano, el Hamiltoniano, no respetan la simetría. Un ejemplo es el del espectro en el efecto Zeeman debido a la presencia de un campo magnético que perturba y rompe la simetría del Hamiltoniano.

Rotura espontánea de la simetría. Las ecuaciones de movimiento, el Lagrangiano, obedecen la simetría, pero las soluciones de menor energía no muestran la misma simetría.

Pueden ser descritas como roturas espontáneas de simetría fases de la materia tales como cristales, imanes y superconductores, así como fases topológicas de la materia como el efecto Hall cuántico fraccionario.

En el caso de un imán a una temperatura alta se tiene que el momento magnético de los átomos del metal apunta con igual probabilidad en cualquier dirección y que, por lo tanto, la magnetización total es nula. Sin embargo, si disminuimos la temperatura por debajo de la llamada temperatura de Curie tendremos que la dirección del momento magnético de los átomos del metal apunta a una dirección preferencial, se tiene que la magnetización total es diferente de cero. La dirección de esta magnetización es al azar, en uno de los mínimos del potencial. Cambiando el valor del potencial, se puede pasar de un potencial con un solo mínimo a otro con dos mínimos. En el primer caso el sistema podrá estar en un solo mínimo y tendremos simetría homogénea. En el segundo caso tendremos una rotura de simetría ya que el sistema en diferentes zonas podrá estar en uno u otro mínimo.

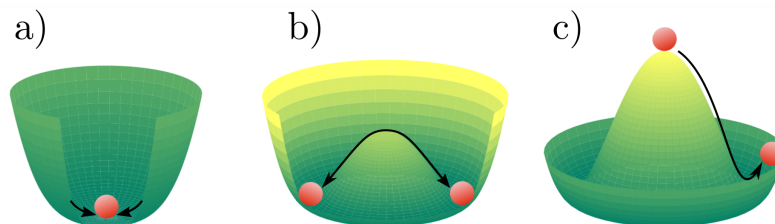


**Figura 1.3:** En esta figura se muestran potenciales unidimensionales. a) Un potencial con un solo mínimo. b) Potencial de transición a uno de dos mínimos. c) Un potencial con dos mínimos equivalentes.

En la figura 1.3 se muestra lo anterior para sistemas con solo una dimensión espacial. En 1.3a el potencial tiene un solo mínimo, en 1.3b tenemos una situación de transición y en 1.3c se tiene dos mínimos con el sistema en uno de ellos.

En la figura 1.4 se muestra esta transición para sistemas bidimensionales. En 1.4a el potencial tiene un solo mínimo. La figura 1.4b es una zona de transición y en 1.4c se tiene una circunferencia de mínimo. Es el potencial llamado de “sombrero mexicano”. Una partícula podrá desplazarse a lo largo de esta circunferencia sin diferencias energéticas.

Se tienen modelos de la dinámica de las partículas elementales con transiciones de fase y roturas de la simetría similares a los anteriores de la materia condensada. Después de la “gran explosión” en que se crearía el Universo, la temperatura sería muy alta y las interacciones electromagnética,



**Figura 1.4:** Se muestran potenciales bidimensionales. a) Potencial de un solo mínimo. b) Se ha roto la homogeneidad y se tienen dos mínimos equivalentes. c) Ese mismo potencial con la forma de un “sombrero mexicano”. Se tiene una circunferencia de mínimos a lo largo de la cual se puede desplazar una partícula sin cambios energéticos.

débil y fuerte entre partículas elementales serían equivalentes, todos casos particulares de una sola interacción simétrica. Al bajar la temperatura se separaría la interacción fuerte de las interacciones electromagnética y débil y se tendría por un lado la interacción fuerte y por otro las interacciones electro-débiles. Esto en un marco teórico y se necesita aún comprobaciones experimentales.

Asociadas al movimiento en el valle circular liso del potencial de “sombrero mexicano”, se tendrían partículas de masa nula como los fotones. Sin embargo, en el mundo real se tienen también partículas con masa no nula. El mecanismo de Higgs es un proceso de rotura espontánea de la simetría mediante el cual los bosones vectoriales pueden obtener masa sin romper explícitamente la invariancia de norma. Esto tiene lugar debido a la interacción entre dichas partículas y los bosones de Higgs, partículas que caracterizarían el estado de menor energía del vacío cuántico. Se encontraron estos bosones de Higgs en el año 2012 con el acelerador de CERN, en Ginebra, Suiza.

Invariancia de norma. Hemos visto que cuando se tiene una invariancia global, como es el caso en el espacio y el tiempo absoluto de Newton, se tienen asociadas leyes de conservación, cantidades conservadas. Tal es el caso de las relaciones entre el tiempo absoluto y la conservación de la energía y entre la isotropía del espacio y el momento angular. Sin embargo, se tienen situaciones en las que, aunque globalmente el sistema no sea invariante, localmente, en pequeñas regiones, lo sea. Tal es el caso en la relatividad general en la que aunque el espacio-tiempo no sea globalmente plano, en pequeñas regiones lo es, aunque pueda diferir entre regiones pequeñas diferentes. Cabe preguntarse que implican estas invariancias lo-

cales, diferentes en las diferentes regiones. Se denominan invariancias de norma. Estas simetrías locales implican la presencia de teorías con campos vectoriales, como es el caso del electromagnetismo, de las interacciones débiles y de las interacciones fuertes, de la cromodinámica cuántica. También se pueden derivar las ecuaciones de la relatividad general considerándola una teoría de norma.

Teorema de Noether. A cada simetría continua le corresponde una ley de conservación y viceversa. Por ejemplo:

La invariancia con respecto a la translación en el tiempo, la homogeneidad temporal, da la ley de conservación de la energía.

La de los sistemas físicos con respecto a la translación espacial (las leyes de la física no cambian con la localización en el espacio) da la ley de conservación del momento lineal.

La invariancia respecto a la dirección del eje de rotación implica la conservación del momento angular.

Este teorema se deriva a partir del formalismo de Lagrange, utilizando las ecuaciones de Lagrange.

Sobre las causas aristotélicas en la teoría del campo cuántico. Para la física clásica y para los aspectos moleculares de la biología contemporánea, la única causa de las cuatro causas aristotélicas que se considera científica es la causa eficiente, causa local en que las relaciones entre efecto y causa se analizan con ecuaciones matemáticas locales. Sin embargo, en la física clásica del siglo XIX se utilizan principios variacionales, "finalistas", de mínimo costo. Tal es el caso cuando se dice que las partículas siguen el camino más corto. Se justifica mostrando que si conocemos los detalles del espacio en que se mueven los cuerpos, la formulación variacional implica las ecuaciones locales de movimiento. Sin embargo, esto presupone el conocer bien dicho espacio lo que puede no conocerse en cosmología o en la física del micromundo. Además, en las teorías de norma de las partículas elementales la estructura formal de las ecuaciones, una causa formal implica la dinámica. Tenemos pues que en la cosmología (la ciencia del macromundo) y en la física de las partículas fundamentales (ciencia del micromundo) de la física contemporánea las tres causas eficientes, final y formal se consideran válidas.

Simetría e invariancia en los organismos biológicos. En los organismos vivos tenemos aspectos genéricos que comparten todos los seres vivos de un taxón y aspectos específicos que caracterizan a cada individuo. Todos los conejos se parecen por su "conejez", pero podemos distinguir a un conejo particular. Sin embargo, mientras en un sistema físico podemos definir

con facilidad cantidades conservadas como la energía o el momento lineal, es mucho más difícil definir lo que caracteriza a un conejo, la "conejez". Además, a lo largo de la vida de un conejo hay características que cambian, hay diferencias entre un conejo joven y uno adulto y a lo largo del tiempo evolutivo cambian las características de la especie. Teniendo esto en cuenta, se ha propuesto que a lo largo de la vida de un ser vivo y a lo largo de la evolución de una especie, se tenga una serie continua de cambios de fase en que las cualidades que definen al organismo en ese tiempo definan las variables de estado conservadas. Vale la pena señalar que en ciertos vidrios se tiene también una fase intermedia continua, de modo que esto corresponde tanto a sistemas físicos como a organismos biológicos. Lo anterior implica que el estudio de los parecidos y diferencias entre sistemas vivos y no vivos puede ser fuente de estudios creativos.

Un enfoque respecto a los organismos biológicos es suponer que el estado básico de un organismo, por ejemplo una célula, es el de crecer y moverse y que sobre este estado básico las leyes de la Naturaleza imponen restricciones que especializan a los taxones o individuos. En general estas restricciones no obedecen leyes sencillas universales como las de la gravitación o el electromagnetismo, sino que muestran características específicas para cada caso. Esto hace que en general, la dinámica de los organismos biológicos dependa mucho de las condiciones iniciales y de las contingencias históricas, características que comparten con otros sistemas complejos.

Vale la pena señalar que existe un formalismo matemático para las restricciones, en que éstas se representan por los llamados fantasmas BRST, que tienen propiedades cuánticas y obedecen ecuaciones parecidas a las de la dinámica de las partículas. Esto puede contribuir a tender un puente entre la dinámica del micromundo y la de los organismos vivos.

#### ALGUNAS PREGUNTAS

1. En el momento actual tiene lugar un gran avance en nuestro conocimiento astronómico y cosmológico. Esto se debe principalmente a telescopios en el espacio exterior terrestre, como el Hubble, que ha permitido obtener información sobre la dinámica de galaxias en tiempos y distancias muy grandes. Se ha encontrado que la mayor parte de la materia del universo no es materia ordinaria, sino materia oscura que solo interacciona gravitacionalmente o energía oscura con características aún más extrañas. No se han encontrado partículas con las características de la materia oscura y se ha preguntado si habrá que



modificar la relatividad general, la teoría de la gravitación de Einstein.

Aunque se ha aumentado la energía de los aceleradores de partículas, lo que ha permitido detectar la partícula de Higgs, el modelo estándar es consistente con los datos experimentales y por el momento no se ve por donde existiría un cambio.

2. A nivel teórico, aunque hay intentos de unificación de la gravedad con las interacciones electro-débiles y fuertes, no se ha logrado una teoría convincente de dicha unificación, lo que sugiere preguntarse si las características geométricas de la teoría gravitacional implican algo diferente a las teorías de partículas.
3. En la segunda ley de Newton y en la teoría gravitacional es un misterio el origen de la inercia. Como la "fricción" de los cuerpos acelerados con el vacío cuántico tiene la misma forma que el término de la aceleración de la segunda ley de Newton cabe preguntarse si la "fricción con el vacío cuántico" es uno de los mecanismos que da origen a la inercia.
4. En el punto crítico de las transiciones de fase, en que se equilibran fuerzas contrarias se tienen leyes de potencias. Se ha visto que diversos niveles de la dinámica de los organismos biológicos se encuentran alrededor de puntos críticos y que leyes de potencias aparecen en muchos aspectos de la física. Pudiera ser que en la Naturaleza domina la dinámica en zona crítica, que en esa zona tiene lugar la dinámica ultramicroscópica y cosmológica y que se podrían comprender aspectos importantes desde ese ángulo.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

## LA MECÁNICA CLÁSICA DEL SIGLO XX

*Rafael Pérez Pascual\**

A principios del siglo XX la mecánica clásica estaba ya desarrollada en términos lagrangianos y hamiltonianos casi como la conocemos en la actualidad. No podemos decir lo mismo en cuanto a las consecuencias de ese desarrollo teórico. Se conocían todas las propiedades de las trayectorias o soluciones de los sistemas mecánicos integrables, esto es, cuales eran sus posibles movimientos e incluso se tenía un algoritmo para reducir a cuadraturas cualquier sistema de estos.

Por otro lado se desconocían las propiedades de los sistemas no integrables, de hecho no se sabía a ciencia cierta sobre la existencia misma de esos sistemas y muchos sospechaban que no existían, es decir, pensaban que todo los sistemas hamiltonianos eran integrables.

El recorrido por el siglo XX se ha dividido en dos partes. En este capítulo iniciaremos el estudio de los sistemas no integrables que nos llevará a solucionar varias incógnitas, desde su existencia, hasta la presencia del llamado caos dinámico como su principal característica. Lo ocurrido durante la segunda mitad del siglo XX se presenta en el [Capítulo 25](#), justamente titulado: "El caos dinámico". De esta forma se tendrá una visión general de la mecánica del siglo XX.

La mecánica clásica, esto es, la teoría newtoniana del movimiento de los cuerpos en el espacio con el transcurso del tiempo, es central para la física en dos sentidos: por sí misma, como la concepción clásica del espacio, el tiempo, la inercia y la interacción entre los cuerpos, que sustentan una teoría del movimiento; y en relación al resto de la física, como base conceptual y metodológica que fundamenta el estudio de los fenómenos de la Naturaleza.

---

\*Departamento de Física Cuántica y Fotónica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

Así, los conceptos de espacio, como contenedor infinito, homogéneo, isotrópico, tridimensional, euclidiano y universal de la materia, y el del tiempo, como un transcurrir constante, continuo y simultáneo que permea a la Naturaleza y la hace móvil, quedan establecidos en los *Principia Mathematica*<sup>1</sup> como el sustrato que nos permite comprender al universo entero. La materia se abstrae en la teoría newtoniana en el concepto de partícula puntual, esto es aquello que ocupa un lugar o punto específico y medible en el espacio y que tiene una única propiedad: la inercia medible por un número real que llamamos masa, cantidad que, para el objeto del estudio del movimiento en el espacio, es lo único que la caracteriza. Las tres leyes newtonianas se construyen en este marco conceptual y proporcionan una teoría del movimiento de las partículas en el espacio con el transcurrir del tiempo y al estar en la presencia de interacciones o fuerzas que sobre ellas actúan.

La publicación de los *Principia* marcan un parteaguas entre los conceptos metafísicos aristotélicos y tomistas de universo, de movimiento y de materia y los conceptos científicos de Galileo y Newton.

El impacto que el trabajo de Newton causó, no se debe únicamente al contenido concreto de su teoría del movimiento, sino a la forma en que se llega a dicha teoría y a sus primeras consecuencias; esto es, al abandono de la formulación de hipótesis metafísicas categóricamente verdaderas, y su sustitución por conceptos y leyes establecidos a partir de la experimentación, la observación y la medición de la Naturaleza, todo ello en el contexto de un pensamiento crítico, analítico e inductivo que nunca olvida la indispensable comprobación, en la realidad misma de la Naturaleza, de todo aquello a lo que nos conduce la teoría. Es en realidad la hazaña de deducir, a partir únicamente de la teoría y de la ley de gravitación, las leyes empíricas de Kepler, lo que convence de la certeza de la teoría y lo que da sustancia a la revolución del pensamiento que hoy llamamos ciencia.

A partir de la publicación de los *Principia* la mecánica se difunde y desarrolla vertiginosamente y en muy poco tiempo se establece como la ciencia del movimiento, como teoría marco para el estudio de los fenómenos físicos y como paradigma del pensamiento científico. Es a partir de Newton que se establecen los conceptos de espacio, de tiempo, de materia y de universo en que se ha de sustentar el pensamiento moderno y que hoy nos parecen naturales, intuitivos y son usados por todos en la vida cotidiana. Solemos olvidar que estos conceptos no fueron, ni naturales, ni intuitivos

---

<sup>1</sup>Nos referimos al libro *Philosophæ Naturalis Principia Mathematica* publicado por Newton en 1687. Puede consultarse en este [hipervínculo](#).

en los tiempos anteriores al pensamiento científico.

La mecánica newtoniana es una teoría determinista del movimiento, no por un pronunciamiento en este sentido, sino porque la evolución temporal del estado físico de un sistema mecánico se establece por una ecuación diferencial ordinaria, ecuaciones que podemos decir que son la definición misma del determinismo, ya que el teorema de existencia y unicidad de sus soluciones nos dice que: dada una condición inicial existe una solución única de la ecuación que, al tiempo dado, toma los valores de dicha condición inicial. Esto implica para los sistemas mecánicos que si un sistema está en un estado físico en un instante del tiempo, queda su estado ciertamente determinado en todo tiempo futuro e incluso pasado. A lo largo del desarrollo de la física en los siglos XVIII y XIX se fue consolidando la idea de una naturaleza determinista en concordancia con el determinismo paradigmático de la mecánica y la idea de la capacidad del hombre de predecir con exactitud el comportamiento futuro de todo sistema físico con sólo conocer su estado en el instante actual o, más bien, en cualquier instante del tiempo.

Para mediados del siglo XIX la mecánica se había desarrollado enormemente, se había formulado en diversas formas matemáticas, como la lagrangiana o la hamiltoniana, las que nos permitían, sin alterar la teoría de Newton, penetrar en ella y diseñar métodos muy poderosos para plantear y resolver esas ecuaciones diferenciales a las que a fin de cuentas nos conducía el estudio de todo sistema mecánico.

Un ejemplo impresionante de esto es el del descubrimiento del planeta Neptuno. A partir de que Herschel descubriera Urano en 1781 se determinaron los parámetros de su órbita y usando la mecánica se calcularon sus futuras posiciones. Tiempo después se encontró que las observaciones del planeta no concordaban con lo calculado, lo que requería de explicación. Una de las ideas que se manejaron para explicar esas desviaciones fue la de la posible existencia de otro planeta que lo perturbara gravitacionalmente. Dos personas, el inglés John Adams y el francés Urbain Le Verrier emprendieron de manera independiente la tarea de calcular, usando la mecánica newtoniana y la ley de gravitación, la posible posición del supuesto planeta perturbador. A finales de 1845 y principios de 1846 ambos trataban de convencer a los observadores de buscar el planeta en las posiciones por ellos calculadas. Los ingleses trataron con los datos de Adams pero no alcanzaban resultados, mientras que los franceses no le hacían caso a la propuesta de Le Verrier; éste, cansado, decidió recurrir a un astrónomo alemán, Johann Galle del observatorio de Berlín, le envió una carta con su propuesta y las coordenadas en las que sus cálculos ubicaban al planeta. Galle recibió

la carta el 23 de septiembre de 1846 y de inmediato emprendió la observación. Esa misma noche, apenas iniciado el 24 de septiembre, encontró el nuevo planeta a menos de un grado de la posición calculada por Le Verrier y, como se supo después, a ocho grados de la calculada por Adams. Hoy, haciendo a un lado las enemistades entre esos tres países y las disputas que se generaron sobre la prioridad del descubrimiento, reconocemos a los tres como los descubridores de Neptuno y al 24 de septiembre de 1846 como el día del descubrimiento.

La capacidad predictiva de la mecánica se vio confirmada con este ejemplo y muchos más. En otras ramas de la física comenzó a ocurrir lo mismo, se llegaba a teorías predictivas, lo que llevó a la idea de que el determinismo predictivo estaba en la Naturaleza misma. Esto llegó incluso a generar posturas de carácter filosófico como la descrita por Laplace en su libro de 1814 *Essai philosophique sur les probabilités*: «Si concebimos una inteligencia que en un instante determinado abarca todas las relaciones entre todos los entes del universo —una inteligencia lo suficientemente amplia que permitiera someter estos datos al análisis—, ésta podría establecer las posiciones respectivas, el movimiento y las propiedades generales de todos estos entes, desde los mayores cuerpos del universo al menor de los átomos; para ella nada sería incierto y el futuro así como el pasado estarían presentes ante sus ojos.».

Durante la segunda mitad del siglo XIX se consolidó la visión hamiltoniana de la mecánica y se desarrollaron poderosos métodos de cálculo y de la teoría de perturbaciones. En la formulación hamiltoniana de la mecánica el estado físico de un sistema queda representado por un punto del espacio fase del sistema. Este espacio, cuya dimensión es dos veces el número de grados de libertad del sistema, está dotado de una estructura simpléctica, lo que permite establecer sistemas de coordenadas privilegiados<sup>2</sup> a los que llamamos canónicos. Un ejemplo son las coordenadas  $(q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n)$  donde las  $q$  son coordenadas para el espacio de configuración<sup>3</sup> y las  $p$  los impulsos correspondientes. En este espacio fase la evolución temporal del sistema queda representada por una curva parametrizada por el tiempo.

Entre los aspectos básicos de la mecánica hay que destacar la exploración de la importancia de las cantidades físicas conservadas, esto es, de las integrales de movimiento. Las integrales de movimiento son las funciones

---

<sup>2</sup>Privilegiados en el sentido de que en esos sistemas de coordenadas la expresión de las ecuaciones de movimiento queda sumamente simple y conveniente.

<sup>3</sup>Espacio en el que un punto representa la configuración posicional del sistema en el espacio físico tridimensional.

del estado físico de un sistema que no dependen explícitamente del tiempo y que permanecen constantes a lo largo de la evolución temporal del sistema, se les pide también que sean suficientemente derivables y estén bien definidas en todo el espacio fase, esto es funciones del espacio fase en los reales que permanecen constantes a lo largo de toda curva que represente la evolución temporal del sistema, un ejemplo es la energía total en el caso de los sistemas conservativos.

A finales del siglo XIX se había encontrado la solución, es decir, se había logrado la reducción a cuadraturas<sup>4</sup>, de muchos sistemas mecánicos y se había visto que todos ellos tenían la propiedad de tener tantas integrales de movimiento independientes como grados de libertad. Es más, la experiencia mostraba que se había logrado la reducción a cuadraturas de muchos de ellos porque se habían encontrado sus integrales de movimiento. En este contexto Liouville logró demostrar que si un sistema mecánico tiene tantas integrales de movimiento independientes como grados de libertad y estas se encuentran en involución<sup>5</sup> entonces el sistema es reducible a cuadraturas. Como la demostración de Liouville es constructiva, no solo demuestra el teorema, sino que proporciona un algoritmo que, a partir de las integrales de movimiento, reduce el sistema a cuadraturas. A los sistemas que cumplen con estas condiciones se les llama integrables. La forma en que se demuestra este teorema permite concluir sobre el comportamiento general de todo sistema integrable, que si es integrable y acotado<sup>6</sup> entonces el movimiento resulta ser cuasiperiódico<sup>7</sup> y, en el caso no acotado, tendríamos una combinación de movimiento cuasiperiódico para los grados de libertad que

<sup>4</sup>Se dice que una ecuación diferencial se ha reducido a cuadraturas cuando logramos expresar analíticamente su solución completa salvo por la presencia de integrales indefinidas que no tiene una expresión analítica.

<sup>5</sup>Por involución entendemos que el paréntesis de Poisson entre cualesquiera dos de ellas es cero. Esta es una condición técnica que podemos entender diciendo que cada una de las integrales de movimiento lo son, no sólo del sistema, sino también de todos los sistemas generados hamiltonianamente por las otras integrales de movimiento.

<sup>6</sup>Por acotado entendemos que el movimiento ocurre en una región finita del espacio fase. Un ejemplo es el caso de un péndulo esférico, espacialmente está constreñido a una esfera que es algo acotado y sus velocidades o impulsos permanecen finitos. En el caso del sistema de Kepler en la región de energía total negativa del espacio fase el movimiento es acotado y en la región de energía positiva no lo es.

<sup>7</sup>Compuesto de movimientos armónicos en cada grado de libertad, ya sea con frecuencias distintas en cada uno de ellos o con algunas o todas las frecuencias iguales. En el espacio fase veríamos las trayectorias organizadas en haces que generan toros de dimensión igual al número de grados de libertad. Estos toros a su vez forman foliaciones que van cubriendo la totalidad de la región acotada del espacio fase. Los toros de estas foliaciones quedan parametrizados por los valores de las integrales de movimiento.

fuesen acotados y de tendencias monótonas asintóticas al infinito para los grados de libertad no acotados<sup>8</sup>.

Como vemos el movimiento de los sistemas integrables es totalmente regular y está muy bien organizado en el espacio fase; naturalmente los toros o los cilindros los debemos entender de manera topológica, es decir, no necesariamente son el producto de círculos y rectas, son el producto de curvas cerradas y abiertas homeomorfas a círculos y rectas respectivamente, pero no son necesariamente círculos o rectas. De hecho, las dificultades para describir un movimiento integrable provienen de la dificultad para encontrar el homeomorfismo que deforma el espacio fase de tal suerte que los toros o cilindros queden rectificadas en toros o cilindros circulares<sup>9</sup>.

Este teorema de Liouville colocó a la mecánica en una situación que muchos entendieron como final, esto porque si pensáramos que todos los sistemas fuesen integrables, entonces todo estaría básicamente resuelto y poco quedaría por hacer más allá que ir resolviendo los casos concretos que resultaran de interés, ya fuese por sus aplicaciones, o por su relevancia teórica.

De hecho, una buena parte de los físicos de finales del siglo XIX consideraban que todos los sistemas hamiltonianos eran integrables, lo que para ellos implicaba que la mecánica era una ciencia ya cerrada. Claro, había aun sistemas no resueltos, entre los que destacaba el sistema de tres cuerpos, pero se pensaba que tarde o temprano alguien encontraría las integrales de movimiento que faltaban y lo reduciría a cuadraturas.

La idea de que todo sistema hamiltoniano acotado fuese integrable y por tanto cuasiperiódico, causaba cierta inquietud entre los que pretendían entender la termodinámica a partir de una visión estadística de los sistemas hamiltonianos de muchas partículas, esto es lo que llamamos mecánica estadística. La razón de ello es que los sistemas integrables no son ergódicos sobre la superficie de energía constante y resultan muy regulares, por lo que no les son aplicables las técnicas estadísticas; además un sistema cuasipe-

---

<sup>8</sup>En el espacio fase las trayectorias también están organizadas en haces pero estos forman cilindros y no toros (los cilindros son las variedades resultantes del producto cartesiano de un toro y un espacio  $R^n$ ), a su vez estos cilindros forman foliaciones del espacio fase.

<sup>9</sup>Podemos imaginar el homeomorfismo en la llamada visión pasiva y entenderlo como una transformación de coordenadas que nos lleva a un sistema de coordenadas en las que la expresión de las trayectorias es la de los círculos y rectas correspondientes a cada grado de libertad. Cuando el sistema es acotado se puede llegar a expresar los círculos por una simple coordenada angular para cada uno de ellos y parametrizar la foliación por toros con una forma específica de las integrales de movimiento en la que todas adquieren la dimensionalidad de una acción, a estos sistemas de coordenadas los llamamos de acción y ángulo.



riódico, regresa casi periódicamente a una vecindad de su estado inicial y esto resultaría en una violación observable de la segunda ley de la termodinámica. Resulta interesante el hecho de que esto no preocupaba a muchos de los termodinámicos, entre ellos a Plank, ya que no estaban convencidos de la teoría atómica y pensaban que la materia era continua, ellos veían a la segunda ley como una ley fundamental de la Naturaleza y no como una ley estadística.

De cualquier forma a finales del siglo continuaba habiendo un gran interés en el problema de tres cuerpos per se o como el sustento de toda la mecánica celeste. Se habían logrado resolver casos particulares pero no el caso general, incluso, casos de mucho interés para la mecánica celeste estaban en espera de solución.

Una de las personas que se interesó en esto fue Henri Poincaré quien, antes de ponerse a buscar las supuestas dos integrales que permanecían ocultas, decidió pensar un poco en la realidad de su existencia, esto es, no fuera a ser que existieran sistemas hamiltonianos no integrables y que el de tres cuerpos fuera uno de ellos o, lo que es lo mismo, que no existieran dichas integrales. Pues bien, esto le llevó a un resultado de gran importancia, demostró la existencia de los sistemas hamiltonianos no integrables. Es más, demostró que entre los sistemas hamiltonianos la no integrabilidad es genérica, esto es, los sistemas integrables son excepcionales y demostró además que el caso general del problema de tres cuerpos es no integrable y por tanto resulta inútil buscarle integrales de movimiento que no tiene.

El comportamiento de los sistemas integrables era totalmente conocido y, gracias a Poincaré, se conocía de la existencia de los no integrables, pero no se conocía cual era su comportamiento. Los toros en que quedan organizadas las trayectorias de los sistemas integrables acotados o los cilindros en que lo hacen las de los no acotados están determinados por las integrales de movimiento, los sistemas no integrables no tienen suficientes integrales. De hecho, genéricamente sólo tienen una: la hamiltoniana<sup>10</sup> misma. Todo esto

---

<sup>10</sup>Cuando nos referimos a los sistemas hamiltonianos en lo general damos por entendido que nos referimos a hamiltonianas independientes del tiempo y, por tanto, la hamiltoniana misma resulta ser una integral de movimiento.

implica que, en los sistemas no integrables, la organización total<sup>11</sup> de las trayectorias en cilindros o toros no puede ocurrir y habrá necesariamente trayectorias que no son cuasiperiódicas ni presentan una tendencia monótona y asintótica al infinito.

Poincaré mismo se dedicó a explorar el comportamiento de los sistemas no integrables, de hecho muchas de sus más importantes contribuciones a la matemática de los sistemas dinámicos las realizó en el contexto de su estudio de los sistemas no integrables. Pasemos entonces a describir los hallazgos de Poincaré.

Poincaré utiliza una estrategia para sus investigaciones inspirada en la teoría de perturbaciones, toma un sistema integrable y acotado por lo que conoce totalmente su solución, digamos un sistema de dos grados de libertad y hamiltoniana  $H_0$ , y estudia un sistema con hamiltoniana  $H = H_0 + \epsilon H_1$ , donde  $\epsilon$  es un parámetro pequeño y  $H_1$  una función del espacio fase en los reales. Poincaré se pregunta sobre la integrabilidad del sistema  $H$ , es decir, sobre la integrabilidad de los sistemas cercanos a ser integrables, si le resulta que el sistema es no integrable pues habrá demostrado la existencia de dichos sistemas, si le resulta que es integrable no tendría una respuesta definitiva. La ventaja de esta estrategia es que puede utilizar las propiedades conocidas del sistema integrable  $H_0$  para aproximarse a las propiedades del sistema  $H$ .

Así, usando técnicas de la teoría de perturbaciones, Poincaré logra demostrar que al presentarse una perturbación de un sistema integrable acotado, la foliación por toros correspondiente se ve perturbada: los toros conmensurables dejan de existir y por cada uno de ellos aparece un número finito de trayectorias periódicas aisladas. Los toros conmensurables ya no existen, se rompen, por lo que el flujo ya no tiene las propiedades que caracterizan a los sistemas integrables. Desde luego esto constituye una demostración de la existencia de los sistemas no integrables y al mismo tiempo nos proporciona una primera característica de esos sistemas: la existencia de soluciones periódicas aisladas.

Es de destacar el hecho de que la estrategia de Poincaré descansa en

---

<sup>11</sup>Total en el sentido que las trayectorias que no forman parte de una de esas estructuras, forman un conjunto de medida cero en el espacio fase. Sabemos que se forman estructuras que llamamos separatrices que separan las distintas foliaciones, un ejemplo claro es el caso del sistema de Kepler, para energías negativas las trayectorias en el espacio fase generan una foliación por toros con órbitas cerradas elípticas, para energía positiva generan una foliación por cilindros con órbitas hiperbólicas y para energía cero generan una sola superficie singular con órbitas parabólicas que separa la foliación por toros de la foliación por cilindros. La superficie singular es la separatriz, es única y tiene medida cero.

argumentos topológicos o geométricos y no en los cálculos y deducciones analíticas. La demostración topológica se enmarca en el camino de una nueva visión de los sistemas dinámicos, la llamada teoría cualitativa de las ecuaciones diferenciales, esto es, la obtención de las propiedades generales básicas de las soluciones de una ecuación sin pasar por las soluciones cuantitativas y precisas, las que, en la mayoría de los casos, ni siquiera tienen expresión en cuadraturas.

Ahora todo esto es de gran importancia y nos enseña que los toros conmensurables desaparecen, pero nada nos dice sobre la suerte que corren los toros inconmensurables y con ellos las trayectorias cuasiperiódicas. Muchos pensaron que así como ocurre con los conmensurables, los inconmensurables también se rompían y esa gran mayoría de trayectorias cuasiperiódicas dejaban de serlo, pero nadie lograba demostrar algo sobre el tema.

Poincaré continuó el estudio de los sistemas cercanos a ser integrables. La presencia de soluciones periódicas aisladas provenientes de la ruptura de los toros conmensurables implica que las hay de carácter estable e inestable<sup>12</sup>. Las inestables presentan una inestabilidad hiperbólica, es decir, una trayectoria periódica inestable tiene asociadas dos variedades, una que llamamos variedad inestable y otra estable. La primera está compuesta por trayectorias que tienden asintóticamente a la periódica y la segunda por trayectorias que se alejan exponencialmente de ella. Estas variedades tienen dimensión menor a la del espacio fase, por lo que el conjunto de las trayectorias que las forman ocupa una medida cero del espacio fase. La inmensa mayoría de las trayectorias, las que no forman parte de alguna de esas variedades, tendrán un comportamiento hiperbólico, por un lado al transcurrir el tiempo tenderán asintóticamente a la variedad estable y, por otro, se alejarán exponencialmente de la variedad inestable, lo que produce un alejamiento exponencial con respecto a la trayectoria periódica.

Poincaré encontró que en los sistemas hamiltonianos acotados necesariamente las variedades inestables se intersectan con las estables y lo hacen un número infinito de veces, esto ocurre de una manera sumamente com-

---

<sup>12</sup>En el caso hamiltoniano el flujo preserva el volumen en el espacio fase, por lo que no hay estabilidad asintótica. Entendemos entonces por estable a una trayectoria periódica tal que las trayectorias cercanas a ella permanecen cerca por largo tiempo; las inestables, por el contrario, hacen que una trayectoria que a un cierto tiempo es cercana se aleje de ellas de manera exponencial con el transcurrir del tiempo.

pleja formando un entramado al que llamamos maraña homoclínica<sup>13</sup>. Esta maraña hace que las trayectorias del sistema deban serpentear en torno a ella de maneras sumamente complejas. Poincaré no llegó a entender plenamente el comportamiento de estas trayectorias, únicamente vislumbró la complejidad del asunto y dejó su impresión sobre tal complejidad en un pasaje del tercer tomo de su gran obra *Les Méthodes nouvelles de mécanique céleste* que reproducimos aquí: “Las intersecciones forman un especie de red, trama o tejido con bucles infinitamente apretados; ninguna de las dos curvas (las variedades) podrán alguna vez intersectarse a si mismas y deben doblarse en una forma tan compleja que intersectarán a todos los bucles de la red un número infinito de veces.

Uno queda apabullado por la complejidad de esta figura que ni siquiera me atrevo a dibujar. Nada puede darnos una mejor idea de la complejidad del problema de tres cuerpos. . .”

Así, la situación de la mecánica clásica a principios del siglo XX, y con ella la de los sistemas dinámicos en general, estaba en una encrucijada. Por un lado se había establecido la existencia y el carácter genérico de los sistemas no integrables, lo que abrió todo un amplio campo de investigación en el seno de una ciencia que muchos consideraban ya agotada. Por otro lado, más allá de entrever su inmensa complejidad, poco era lo que se lograba avanzar en el entendimiento del movimiento no integrable.

Ahora, a principios del siglo XX la física entra en una fase crítica que lleva a una revisión de sus conceptos fundamentales, el de espacio, tiempo y materia, nos referimos a la relatividad especial y a la mecánica cuántica. En gran medida, y de manera natural, la atención de los físicos se encaminó hacia estas dos grandes revisiones y a sus consecuencias; el asunto de los sistemas no integrables se fue dejando atrás y podemos decir que casi se olvidó<sup>14</sup>. No fue hasta mediados de la década de 1960 que el problema de los sistemas no integrables recobró su importancia y comenzaron a darse importantes avances en su estudio. Muchos fueron los factores que impulsaron este revivir, pero sin duda uno de los más relevantes fue la capaci-

---

<sup>13</sup>Esta nomenclatura se refiere a la intersección de las variedades de una misma trayectoria, si se trata de la intersección de variedades provenientes de dos trayectorias distintas se usa la palabra heteroclínica. Las variedades del mismo tipo, ya sea estable o inestable, no se pueden intersectar.

<sup>14</sup>Es ilustrativo de este olvido el hecho de que el libro de texto de mecánica clásica más influyente de la segunda mitad del siglo XX, el libro de Herbert Goldstein, en su primera edición de 1950, no menciona el hecho de la existencia de los sistemas no integrables, dejando la impresión en el lector de que todo sistema es integrable. Es hasta la tercera edición de 2002 que se incluye un capítulo al respecto.

dad de cálculo que las computadoras le dieron a los físicos, lo que permitió explorar numéricamente el comportamiento de algunos de estos sistemas, cuestión que anteriormente era imposible. Pasemos pues a describir cuales han sido los principales hallazgos en este, hoy muy importante, campo de la física.

Comencemos por el problema del destino de los toros inconmensurables al perturbar un sistema integrable acotado. En los principales laboratorios que participaron en el proyecto Manhattan fue indispensable contar con gran capacidad de cálculo numérico, por lo que se desarrolló enormemente la construcción de computadoras; esto continuó después de la guerra y para el año de 1952 en el laboratorio de Los Alamos terminaron de construir la que en su época pudo haber sido la mayor computadora, la llamaron MANIAC. Naturalmente estaba destinada a los cálculos que requería la continuidad de las investigaciones nucleares, en especial las del programa termonuclear, y por tanto el acceso a ella estaba totalmente restringido, sin embargo tres investigadores de dichos laboratorios, Enrico Fermi, John Pasta y Stanislaw Ulam emprendieron un cálculo en el terreno de los sistemas no integrables.

Fermi pensaba desde hacia tiempo que al perturbar un sistema integrable no sólo se rompían los toros periódicos sino también los cuasiperiódicos y en el caso de un sistema de muchas partículas, al desaparecer el comportamiento cuasiperiódico el sistema se hacia ergódico y por tanto tendería al equilibrio termodinámico; esto implicaba una tendencia a la equipartición de la energía entre sus grados de libertad. Para ver esto diseñaron un sistema de 32, y después, uno de 64 partículas de la misma masa unidas por resortes lineales idénticos y formando un sistema unidimensional que es la representación discreta de un medio elástico unidimensional.

Este sistema es integrable y se puede describir muy simplemente en coordenadas normales, cada uno de sus grados de libertad se representa por uno de los modos normales de oscilación y cada modo resulta ser un oscilador armónico totalmente desacoplado de los demás; de esta suerte el movimiento general del sistema resulta cuasiperiódico si las frecuencias normales son inconmensurables o periódico si son conmensurables, este es el comportamiento típico de los sistemas integrables acotados. Si inicialmente toda la energía esta concentrada en un grado de libertad, es decir, solo está excitado un modo normal, la evolución temporal será la del movimiento de ese modo, los demás permanecerán como fueron puestos al principio, en total reposo. Vemos que la energía se queda en el modo excitado y no se distribuye entre los otros, esto es, no ocurre la equipartición de

la energía.

Ahora bien si introducimos una pequeña perturbación, es este caso por medio de hacer que los resortes tuvieran un pequeño comportamiento no lineal adicional al de su comportamiento lineal, el sistema se haría no integrable, aunque permanecería cercano al integrable; todos los toros se romperían, pensaba Fermi, desaparecería el dominio de lo cuasiperiódico y los grados de libertad quedarían acoplados, entonces el sistema se haría ergódico y en su evolución temporal la energía, concentrada inicialmente en uno de los grados de libertad, se distribuiría de manera homogénea entre todos los grados de libertad. No quedaba más que programar la computadora para resolver este sistema de 32 (64) grados de libertad y ver como se va distribuyendo la energía en obediencia al “teorema” de la equipartición de la energía. La mayor dificultad: programar la computadora, para ello requirieron de la participación de Mary Tsingou quien era experta en ese vital asunto, razón por la que hoy nos referimos a este sistema como el sistema de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou o más fácil como el problema de FPUT.

La computadora comenzó a dar resultados y todos quedaron perplejos, el sistema no tendía a la equipartición de la energía, esto es, al equilibrio termodinámico. Se iniciaba el cálculo con toda la energía en uno de los grados de libertad, al transcurrir el tiempo se veía que la energía comenzaba a repartirse, pero de pronto se invertía esta situación y la energía comenzaba a regresar al grado inicial hasta que este contenía la mayor parte, entonces comenzaba nuevamente a distribuirse hasta llegar nuevamente a un punto en el que se invertía la situación y esto se repetía y repetía, no exactamente igual cada vez, pero si, cualitativamente idéntico. Naturalmente, este comportamiento es el que se espera de algo cuasiperiódico, parecía como si aún quedaran los toros inconmensurables formados. Intentaron cambios en los parámetros, en el número de partículas y en las condiciones iniciales, pero siempre ocurría lo mismo.

Fermi, quien creía haber demostrado que los toros inconmensurables corrían la misma suerte de los conmensurables, no entendía lo que pasaba, pero de los resultados no había duda, no quedaba más que reportarlos, redactar un artículo y publicarlo. Desafortunadamente Fermi murió a los 53 años cuando aún no se terminaba la redacción. El manuscrito se terminó de redactar sin su participación y, como el laboratorio de Los Alamos tenía una componente militar, debía ser sometido a una revisión de seguridad antes de publicarse. El manuscrito quedó finalmente como un reporte reservado de Los Álamos de muy escasa difusión; hubo de transcurrir una década

hasta que fue posible su publicación amplia como parte de la edición de la obra completa de Fermi.

En esas mismas fechas de mediados de los años 50 en la Unión Soviética Andrey Kolmogorov, interesado también en la suerte de los toros inconmensurables de un sistema mecánico integrable sujeto a una perturbación, ideó un procedimiento novedoso de carácter iterativo que, para el estudio de este tipo de problemas, podía substituir a los métodos de la teoría de perturbaciones sustentados en desarrollos en serie. Los métodos típicos de la teoría de perturbaciones habían resultado inútiles para atacar el problema, esto debido a la presencia de términos seculares o de denominadores pequeños que llevaban a la no convergencia de las series; un proceso iterativo puede converger mucho más rápido que un desarrollo en serie, lo que abre posibilidades de atacar problemas teóricos como el del destino de los toros inconmensurables. Kolmogorov presentó sus ideas en un congreso de carácter local en la Unión Soviética y sólo se publicaron como una pequeña contribución de un página en las memoria del congreso en ruso. Las ideas de Kolmogorov prácticamente no se difundieron fuera de la Unión Soviética.

La década de los sesenta fue crucial para esta cuestión, Vladimir Arnold<sup>15</sup>, usando las ideas de Kolmogorov, logró evitar el problema de los denominadores pequeños y resolvió el asunto del destino de los toros inconmensurables. De manera independiente Jürgen Moser, matemático alemán, logró resultados similares. Hoy conocemos estos resultados con el nombre del teorema de KAM<sup>16</sup>, que establece que en el sistema perturbado  $H = H_0 + \epsilon H_1$ , para  $\epsilon$  suficientemente pequeña, los toros inconmensurables del sistema integrable  $H_0$  se rompen, pero no se rompen todos. Con mayor precisión: los toros inconmensurables en el sistema integrable tienen medida uno, ya que los conmensurables son numerables, como lo son los números racionales; al actuar la perturbación se rompen de inmediato todos los conmensurables y también algunos de los inconmensurables. Ésto último de tal suerte que la medida que ocupan los toros inconmensurables que no se rompen es distinta de cero y es una función monótona decreciente del parámetro  $\epsilon$ , cuando  $\epsilon$  tiende a cero la medida tiende a uno y cuando  $\epsilon$  tiende a un valor crítico finito,  $\epsilon_c$ , la medida tiende a cero. Esto es, en  $\epsilon = \epsilon_c$  se habrán roto todos los toros y ya no habrá trayectorias cuasiperiódicas, o al menos no ocuparan medida. Desde luego cuando el parámetro tiene un valor intermedio tendremos un conjunto de toros inconmensurables inter-

<sup>15</sup>Alumno de Kolmogorov que había alcanzado fama por resolver el problema trece de la lista de problemas de Hilbert a la edad de 19 años.

<sup>16</sup>De Kolmogorov, Arnold y Moser.

calados por una especie de intersticios dejados por los toros que ya se han roto, estos intersticios están llenos de trayectorias del sistema que no generen estructuras, claro, sobre los toros que sobreviven las trayectorias serán cuasiperiódicas.

En resumen, el comportamiento cuasiperiódico de los sistemas integrales acotados no se pierde totalmente al ser perturbados y dejar con ello de ser integrales; conviven en el espacio fase comportamientos cuasiperiódicos con comportamientos que no son ni periódicos, ni cuasiperiódicos, los llamaremos aperiódicos; no debemos olvidar que las trayectorias periódicas aisladas están presentes y también que puede haber cuasiperiódicas aisladas, pero ocupan medida cero; claro, a medida que el sistema se hace más lejano de ser integrable, esto es  $\epsilon$  se acerca a  $\epsilon_c$ , la medida ocupada por el comportamiento cuasiperiódico se reduce y cuando  $\epsilon$  rebasa  $\epsilon_c$  el comportamiento aperiódico ocupará toda la medida, esto es, será genérico.

La estructura de toros e intersticios que se forma resulta ser muy compleja, pues la única forma en que se pueden tener estructuras como los toros no rotos, que no tienen una ocupación continua<sup>17</sup>, que cada uno de ellos tiene volumen cero, pero que tomados en conjunto sí ocupan un volumen, es decir, que tienen medida distinta de cero, es con estructuras cantorianas fractales. Esto es, estructuras que presentan escalamiento, o sea, estructuras que al tomar una parte de ellas y amplificarla obtenemos algo similar a la estructura que teníamos, incluido el hecho de que se puede repetir el proceso indefinidamente.

Los resultados extraños de FPUT ya no son extraños, el teorema de KAM nos dice que los sistemas suficientemente cercanos a uno integrable deben tener ese comportamiento, la cuasiperiodicidad es robusta<sup>18</sup>. Hemos pues llegado a resolver las incógnitas dejadas por Poincaré, pero han surgido otras aun más inquietantes.

Los comportamientos cuasiperiódicos, típicos de los sistemas integrales acotados, si bien son robustos, dejan de ser importantes para los sistemas que no sean cercanos a algún sistema integrable, o sea, para la inmensa mayoría de los sistemas no integrales el comportamiento genérico es el aperiódico, pero no sabemos que características tiene este tipo de movimiento. A mediados de los años sesenta, con el teorema de KAM, se había resuel-

---

<sup>17</sup>En cualquier vecindad de un toro hay intersticios y cada intersticio es un pedazo continuo del espacio fase que tiene un volumen finito.

<sup>18</sup>Aquí hay que mencionar que la aplicación del teorema a FPUT no es directa pues el teorema requiere que  $H_0$  sea no degenerada y para el caso de FPUT si lo es. En realidad se ha hecho ver que se puede extender el teorema a ciertos casos degenerados entre los se encuentra FPUT.



to la gran incógnita de principios de siglo, pero surgía una nueva: ¿Cómo se comportaban las trayectorias aperiódicas típicas de los sistemas no integrables? Dejaremos esta incógnita para el [Capítulo 25](#) de este mismo libro, titulado “El caos dinámico”.

PARA SABER MÁS:

- Whittaker, E. T., *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies*, Cambridge University Press, 1988.
- Arnol'd, V. I., *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer-Verlag, 1989.
- Rasband, S. Neil, *Dynamics*, Wiley, 1983.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

## EL TIEMPO Y SU FLECHA

Mariano Bauer Ephrussi\*

¿Qué es el tiempo? ¿Una coordenada más que se suma a las coordenadas espaciales como marco del devenir de los sistemas físicos, o una propiedad dinámica de estos? ¿Porqué los procesos en la Naturaleza se desenvuelven siempre hacia el futuro cuando las leyes que los rigen — mecánica clásica, mecánica cuántica, electrodinámica clásica y cuántica (relativistas y no relativistas), etc. — no excluyen la posibilidad de ir hacia el pasado?

Son estas y otras, preguntas cuyo debate inicia desde la antigüedad y continúa hoy en día. A discusión está todavía si las diversas flechas del tiempo identificadas son realmente una sola, y cómo se da el paso de la reversibilidad a la irreversibilidad.

Todo el mundo sabe lo que es el tiempo. Nuestro reloj nos indica el instante en que ocurrió un suceso o nos permite establecer la duración de un proceso. Más aún, a diario constatamos que en el mundo en que existimos los procesos proceden — salve la redundancia — en un solo sentido. No se puede retroceder en el tiempo. “El hombre común lo sabe, el poeta lo lamenta; esto es una de las más severas trabas de nuestra vida”<sup>1</sup>, nos dice Léon Brillouin en su artículo *The arrow of Time*, en “**Time in science and philosophy**”.

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

<sup>1</sup> Sirva de ejemplo:

Le livre de la vie est le livre suprême  
qu'on ne peut ni fermer ni rouvrir à son choix.  
On voudrai revenir à la page où l'on aime,  
et la page où l'on meurt est déjà sous nos doigts.

Alphonse de Lamartine 1790 – 1869

(El libro de la vida es el libro supremo, que no se puede cerrar ni reabrir a voluntad. Quisiéramos volver a la página donde amamos, y la página donde morimos bajo nuestros dedos ya está).

Todo el mundo — menos los físicos. ¿Es el tiempo solo parte del sistema de referencia espacio temporal que un observador utiliza para ubicar un sistema o un evento y su evolución? ¿O es una propiedad dinámica del sistema observado? ¿Son instante y duración lo mismo? ¿Por qué se ordenan los procesos en forma única cuando las leyes que los rigen no privilegian un sentido sobre el opuesto? Cabe citar: “Sin embargo el sentido de historia del tiempo no aparece ni en la mecánica de Newton ni en la mecánica cuántica (al menos en el tratamiento de problemas con número finito de grados de libertad)” (I. Prigogine, *Time, Structure and Entropy*, en “**Time in science and philosophy**”). A estos campos se puede añadir la teoría de la Relatividad, Especial y General, aunque en esta última se complica más el problema; y no se diga cuando se quiere integrar la Relatividad General con la Mecánica Cuántica.

#### LA HISTORIA DEL TIEMPO EN EL TIEMPO

Aunque podríamos ir hasta tiempos antiguos citando a los filósofos griegos, debemos limitarnos al contexto de la física como disciplina científica. Esta se inicia con Newton, quien plasma la regularidad de las observaciones de Copérnico y las leyes de Kepler ([Capítulo 17](#)) en ecuaciones en el cálculo diferencial que el mismo inventa con este propósito. La ley de movimiento — 2.<sup>a</sup> ley — involucra la segunda derivada con respecto al tiempo, por lo cual es invariante frente al cambio de  $t$  por  $-t$ , o lo que es equivalente, frente a la inversión de la dirección del movimiento. Newton afirma por demás que el tiempo es elemento absoluto común a todos los marcos de referencia espaciotemporales en que distintos observadores “inerciales” encuadran sus observaciones. La ley es única y la diversidad de movimientos obedece a las condiciones a la frontera que pueden ser iniciales o finales, con lo cual se puede deducir igualmente hacia donde se dirige el movimiento en el futuro o de donde proviene en el pasado. Newton introduce así el “instante de tiempo” — la variable  $t$  — como coordenada única para todo observador independiente de su ubicación en el espacio, y la duración de un proceso como una diferencia de instantes, que por tanto es considerada invariante.

La existencia de una constante universal — la velocidad de propagación de las ondas electromagnéticas en el vacío — que revelan las ecuaciones de Maxwell y que confirman las mediciones de Michelson y Morley, conduce a Einstein a replantear la relación recíproca entre las observaciones en distintos sistemas inerciales. Concluye que tiempo y espacio están entrelazados

precisamente en la forma que Lorentz había derivado anteriormente para asegurar la invariancia de las ecuaciones de Maxwell. Se modifica la mecánica de Newton y se deroga el tiempo absoluto. Los marcos de referencia de los distintos observadores inerciales quedan ligados por las transformaciones de Lorentz, pero siguen siendo marcos de referencia. Esto es el contexto de la Relatividad Especial ([Capítulo 4](#)).

La consideración del tiempo como una cuarta dimensión (espacio-tiempo de Minkowski), aunque muy especial ya que se transita en una sola dirección, sufre un revés con el advenimiento de la mecánica cuántica, producto de la existencia de otra constante universal en la naturaleza, el cuanto de acción de Planck. Las variables dinámicas se transforman en operadores ([Capítulo 32](#)), pero el tiempo permanece como parámetro en la ecuación de Schrödinger debido a la objeción de Pauli a una relación de incertidumbre energía-tiempo análoga a la de posición-momento.<sup>2</sup> Se preserva al tiempo como parte de un marco de referencia espacio-temporal que encuadra el devenir de los sistemas, y esto subsiste en la mecánica cuántica relativista y en la teoría de campos cuántica, donde se revierte posición y momento a cantidades clásicas pero se introducen operadores de creación y aniquilación de partículas en puntos del espacio tiempo. La múltiple comprobación experimental de la ecuación de Schrödinger confirma al parámetro  $t$  como el tiempo que mide el reloj del laboratorio. La no existencia de una variable dinámica con dimensión de tiempo representada por un operador constituye el **Problema del Tiempo en la Mecánica Cuántica**, al cual se le han dedicado innumerables trabajos desde hace más de ochenta años [[1](#), [2](#)].

La Relatividad General — en que Einstein independiza las leyes físicas de todo observador — agrava el problema. La materia distorsiona el espacio-tiempo haciéndolo dinámico. En palabras de John Archibald Wheeler (*“Geons, Black Holes and Quantum Foam: A life in physics”*): “El espacio-tiempo dice a la materia como moverse; la materia dice al espacio-tiempo como curvarse” (ver [Capítulo 6](#)). Ya el tiempo no es parte de un marco de referencia externo e independiente en el cual se describen los movimientos de los sistemas materiales. Si desaparece la materia, desaparece

<sup>2</sup>... Sin embargo, no es posible en general construir un operador Hermitiano (e.g., como función de  $p$  y  $q$ ) que satisfaga esta ecuación. Esto es así porque, de la relación de conmutación, se sigue que  $H$  posee continuamente todos los valores propios de más a menos infinito, en tanto que por otro lado, valores propios discretos pueden estar presentes. Concluimos, por consiguiente, que la introducción de un operador  $T$  está básicamente prohibida y que el tiempo  $t$  necesariamente debe ser considerado como un número ordinario (“número  $c$ ”) en la Mecánica Cuántica.” W. Pauli, “General Principles of Quantum Mechanics”, Springer-Verlag, 1980, p. 63

el marco. Lo anterior hace que la integración de la relatividad general con la mecánica cuántica — la llamada Gravedad Cuántica —, enfrente una incompatibilidad fundamental: en mecánica cuántica el tiempo es un parámetro, parte de un marco de referencia y no una variable dinámica representada por un operador, mientras que en relatividad general el tiempo es dinámico y local. Más aún, el tiempo *no aparece* en la ecuación de Wheeler–deWitt que se obtiene al aplicar la cuantización canónica (cambio de variables dinámicas clásicas por operadores y paréntesis de Poisson por conmutadores) a la formulación Hamiltoniana de las ecuaciones de Einstein. Esto constituye el **Problema del Tiempo en la Gravedad Cuántica**, al cual también se han dedicado innumerables trabajos desde los años cincuenta del siglo pasado y que no se considera resuelto [3].

Quedan pendientes entonces las preguntas: ¿Se puede definir un operador con dimensión de tiempo que represente una propiedad dinámica interna de los sistemas físicos? ¿Cuál sería su relación con el tiempo de laboratorio, *i.e.*, el parámetro  $t$  de la ecuación de Schrödinger? ¿Cómo llegó este parámetro a la ecuación? ¿Cuál es el estatus de la incertidumbre tiempo–energía? ¿Si existe tal operador, cuál puede ser su papel en la Gravedad Cuántica?

#### LA(S) FLECHA(S) DEL TIEMPO

Es divertido ver, en película pasada hacia atrás, al clavadista surgiendo del agua para posarse elegantemente en el trampolín, a los pedazos de un jarrón chino valioso reconstruir el jarrón para alivio del dueño, pero esto no se observa en la vida diaria. Sin embargo, las leyes físicas que rigen nuestro entorno — mecánica relativista, clásica y cuántica, electromagnetismo, teoría cuántica del campo — no descartan estas sucesiones de eventos; son invariantes frente a la inversión del tiempo. ¿Porqué los eventos reales, registrados durante la filmación, ocurren pero su inverso no, es decir, son irreversibles? ¿Tiene el tiempo necesariamente una flecha? ¿Cual es su origen? Estos cuestionamientos han recibido múltiples respuestas. La lista es extensa, hasta diez, pero destacan las siguientes.

*La flecha termodinámica.* El concepto de “irreversibilidad” ([Capítulo 20](#)) se gesta en el desarrollo de la termodinámica ([Capítulo 18](#)), a mediados del siglo XVIII y queda plasmado en la 2.<sup>a</sup> ley de la termodinámica y su fundamentación estadística desarrollada por Boltzmann. La entropía como propiedad de un sistema termodinámico macroscópico (compuesto de un número enorme de átomos y moléculas) es asociada con el grado de desorden.

La 2.<sup>a</sup> ley establece entonces que los procesos ocurren siempre en la dirección de un incremento del desorden. Así, citando a Stephen Hawking (“A brief history of time: from the big bang to black holes”), “El incremento de la variable termodinámica, entropía, puede asociarse con cambio progresivo, y por consiguiente con la dirección del tiempo”, ó, “El incremento en desorden o entropía con el tiempo es un ejemplo de lo que se llama una flecha del tiempo, algo que distingue el pasado del futuro, dando una dirección al tiempo. Hay por lo menos tres distintas flechas del tiempo”. Para él, estas son la flecha termodinámica, la flecha cosmológica y la flecha psicológica (“la dirección en que sentimos que el tiempo pasa, la dirección en la cual recordamos el pasado pero no el futuro”), planteándose el demostrar porqué las tres apuntan en la misma dirección. En un sistema complejo, las configuraciones en que los elementos están en desorden son mucho más numerosas que las configuraciones en que están ordenados, lo cual confiere al desorden una mayor probabilidad de realizarse ([Capítulo 24](#), [Capítulo 26](#)).

*La flecha radiativa.* La ecuación de onda que subyace los fenómenos ondulatorios en sólidos, líquidos y gases, así como las ondas electromagnéticas que se derivan de las ecuaciones de Maxwell, tiene soluciones avanzadas y retrasadas por su invariancia con respecto a inversión del tiempo. Sin embargo solo las soluciones atrasadas parecen realizarse: son las que surgen de una fuente y se alejan de ella (en el ejemplo del clavadista, se observan ondas en el agua que se alejan del punto de impacto y nunca al revés). Son fenómenos aparentemente irreversibles.

*La flecha cosmológica.* La observación del astrónomo Hubble de que las galaxias se están alejando entre sí, sugiere que el Universo no es estático, que está en expansión y que surgió de una “Gran Explosión” (Big Bang), obviamente en el pasado. El futuro puede ser una expansión continuada, o bien, una contracción a un volumen infinitesimal, dependiendo de la densidad de materia, pero hay una dirección temporal cósmica. Esto ya es una solución de las ecuaciones de la Relatividad General, que Einstein mismo quiso enmendar introduciendo un término *ad hoc*, la constante cosmológica, para obtener una solución estática. Se añade a lo anterior la preponderancia presente de materia sobre antimateria, aún cuando la teoría cuántica de campos predice que la creación o aniquilación de una partícula se acompaña siempre de la antipartícula correspondiente, lo cual ha sido comprobado experimentalmente. Descartado por varias razones que esta asimetría haya ocurrido en el Big Bang, la diferencia entre materia y antimateria se ha ido generando posteriormente, y su origen debe buscarse en la dinámica que rige entre las partículas elementales, esto es, en la mecánica cuántica, a par-

tir de la violación de la invariancia CP (conjugación de carga y reflexión de coordenadas) como lo propone Saharov.

*La flecha cuántica.* a) En el Modelo Estándar en donde se logra la unificación de las fuerzas electromagnéticas y las nucleares, fuerte y débil, esta última introduce la existencia de violación de la inversión en el tiempo en ciertos procesos, lo cual ha sido observado (esta violación queda compensada por una violación CP de manera que se respeta la invariancia conjunta CPT). Se tiene una flecha del tiempo cuántica. Sin embargo se demuestra también que es notablemente insuficiente para explicar la ausencia de antimateria. El problema queda abierto todavía. A lo mejor la solución se encuentra en las extensiones del Modelo Estándar que se consideran ya necesarias (Capítulo 46). b) El proceso de medición en mecánica cuántica (motivo de antiguo y continuado debate) involucra como trasladar un evento microscópico a una señal macroscópica, como por ejemplo ocurre en un fotomultiplicador. Una interesante formulación teórica de la medición como proceso enteramente cuántico es la de Wojciech Hubert Zurek: el entrelazamiento con el entorno permite desarrollar un conjunto de paquetes de onda cuasi ortogonales (*estados punteros*) que corresponderían a los registros de un aparato macroscópico [4]. En todo caso, el proceso de medición es comúnmente aceptado como irreversible por lo que conllevaría una asimetría temporal.

Cabe aquí una advertencia. Se ha querido asociar la irreversibilidad al llamado “colapso” de la función de onda (al detectarse la partícula en un punto desaparece la distribución de probabilidad de encontrarlo en otro). Este colapso no existe. Es una de las consecuencias ridículas a que nos conduce el asociar a una sola partícula las observaciones recogidas de experimentos con muchas partículas, como advirtió Schrödinger<sup>3</sup> hace 60 años y que ilustró con el famoso “gato de Schrödinger”. El extraordinario experimento de la doble rendija con electrones individuales, de Akiro Tonomura y colaboradores (ya replicado con fotones) [5, 6], muestra que el patrón de interferencia (aspecto ondulatorio) es resultado de la acumulación de eventos individuales (aspecto corpuscular). El histograma de los puntos de captura de la secuencia de electrones no desaparece al recibirse un electrón más, sino se refuerza (y es el mismo en distintas corridas aunque el orden individual de la capturas difiera; la densidad de probabilidad  $[|\Psi(x, t)|^2]$

---

<sup>3</sup>“Nunca experimentamos con un solo electrón u átomo o (pequeña) molécula. En experimentos pensados algunas veces asumimos que lo hacemos; esto invariablemente implica consecuencias ridículas” (E. Schrödinger, “Are There Quantum Jumps?: Part II”, *The British Journal for the Philosophy of Science* Vol III (10) 109-123 (1952))



representa el límite del histograma en un número infinito de eventos acumulados en espacios infinitamente pequeños). Hay que desear de una vez por todas la interpretación “travesti” (Bauer *dixit*) de la mecánica cuántica, que pretende identificar la dualidad onda–corpúsculo como propiedad de una sola partícula.

*La flecha causal.* Si la existencia de un evento  $B$  está siempre correlacionado con la existencia de un evento  $A$ , aunque no a la inversa, a  $A$  se denomina causa y a  $B$  efecto. El llamado Principio de Causalidad introduce el tiempo al postular que la causa antecede al efecto. Si en la mecánica de Newton la correlación física entre dos eventos puede ser instantánea independientemente de cual es la distancia que los separa, la Relatividad Especial asigna a la constante universal el papel de tope a la velocidad de transmisión de todo efecto físico. La apreciación del lapso de tiempo entre causa y efecto puede variar de acuerdo al observador, pero eso sí, nunca puede resultar en el intercambio de causa y efecto cualquiera que sea el movimiento relativo. En la representación del espacio–tiempo de Minkowski, a un evento se le asocia un “cono de luz”, dentro del cual hacia atrás están todos los eventos que pudieran haber influido en este y hacia adelante todos los eventos en los que puede influir. Fuera del cono de luz se encuentran todos los eventos que pueden considerarse independientes del evento considerado. La salvaguarda de este principio de causalidad es reconfortante. Sin embargo aún se debate si constituye en sí el origen de la flecha del tiempo, debido a consideraciones sobre la correlación entre causa y efecto.

*La flecha biológica.* La evidencia de su existencia está ya contenida en el poema citado en la introducción. Del nacimiento se procede inexorablemente a la muerte. Aun cuando la creación de un ente biológico implica un proceso ordenador en el cual la entropía decrece localmente, dejado a su suerte en interacción con su entorno, el ente biológico evoluciona hacia el estado de máxima entropía. La flecha psicológica podría estar incluida aquí, dado que el cerebro humano es un ente biológico y su funcionamiento psicológico decae a la par de su funcionamiento físico. Hawking por su parte afirma que la flecha psicológica está determinada por la flecha termodinámica y que necesariamente apuntan en la misma dirección; lo cual no sucede con la flecha cosmológica en toda la historia del universo.

Sin embargo, siguen vigentes preguntas como: ¿Son estas flechas una sola? ¿Es la irreversibilidad una propiedad fundamental o solo la consecuencia de la dificultad práctica de implementar las condiciones iniciales que darían lugar al fenómeno inverso? En esta línea de ideas se muestra por ejemplo que se puede imponer una condición de frontera natural de ba-

ja entropía inicial a la función de onda del universo. Se sigue que la flecha del tiempo está correlacionada con el tamaño del Universo y que emerge de una creciente decoherencia debida a un entrelazamiento con grados de libertad no observados, unificando las flechas termodinámica y cosmológica.

### ¿UNA LUZ AL FINAL DEL TÚNEL?

Adelantos recientes tanto teóricos como experimentales, empiezan a responder algunas de las preguntas planteadas arriba, a saber:

1. ¿Como llega el parámetro  $t$  del sistema de referencia en el laboratorio a la ecuación de Schrödinger que rige la dinámica en la mecánica cuántica? Existe ya una formulación en que se muestra como, a consecuencia del entrelazamiento del sistema microscópico con su entorno macroscópico clásico — donde existe un reloj —, el entorno monitorea al sistema microscópico. En efecto, a partir de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que describe al sistema entrelazado completo, se deriva que, al deslindar la parte del sistema microscópico, este satisface la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo [7]. El tiempo emerge internamente como consecuencia del entrelazamiento, mientras que el sistema completo aislado es independiente del tiempo. Por más extraño que parezca, existe ya un experimento que ilustra esta situación [8].
2. ¿Se puede definir en la mecánica cuántica un operador con dimensión de tiempo, que obvie la objeción de Pauli y de lugar a una relación de incertidumbre semejante a la de posición y momento? Una primera propuesta lo constituyó  $\hat{T} = (1/2m)\{\hat{p}^{-1}\hat{x} + \hat{x}\hat{p}^{-1}\}$  basada en el Hamiltoniano no relativista de partícula libre,  $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ . Este operador no es auto-adjunto ya que manifiesta una divergencia en  $p = 0$  y por consiguiente no puede representar un observable de acuerdo a von Neumann. A pesar de esto, el operador ha sido discutido ampliamente a través de los años con base en una ampliación del concepto de observable (POVM: “positive operator value measure”). La mecánica cuántica relativista ofrece una alternativa donde se introduce un operador de tiempo auto-adjunto  $T = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{r}/c + \beta\tau_0$ , donde  $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$  y  $\beta$  son las matrices de Dirac y  $\tau_0$  una propiedad interna del sistema. Este operador puede representar un observable, así como puede ser —por el teorema de Stone–von Neumann— el generador de una

transformación unitaria que implica un desplazamiento en momento y consecuentemente en energía, salvando la objeción de Pauli [9].

3. ¿Puede este operador proporcionar compatibilidad entre la Relatividad General y la Mecánica Cuántica? El esquema de Heisenberg le asigna a este operador auto-adjunto la dependencia del parámetro  $t$  al igual que a todos los operadores asociados con observables del sistema. Es por tanto un operador dinámico que puede jugar el papel del observable que ordena la temporalidad de los demás a través de la probabilidad condicionada, entre la observación conjunta de este con los demás — propuesta para restituir el tiempo desaparecido en la cuantización canónica referida anteriormente.

Es necesario señalar que lo anterior no es aceptado todavía como posible solución al problema del tiempo. De hecho hay desarrollos importantes en Gravedad Cuántica que optan por dejar de lado toda referencia al tiempo.

## CONCLUSIÓN

En realidad no hay conclusión ya que el tema no está cerrado. Caben solo algunas observaciones. La principal es, y cito: “Los conceptos más invocados son los conceptos de irreversibilidad y de invariancia ante inversión del tiempo. Invariancia ante inversión del tiempo es una propiedad de las leyes físicas: una ley física es invariante frente a reflexión en el tiempo cuando queda expresada por una ecuación diferencial que es invariante ante la transformación  $t \Rightarrow -t$ . En contraste, irreversibilidad es una propiedad de los procesos: un proceso es irreversible si se observa siempre en el mismo orden temporal, y nunca en el orden inverso. El problema de la flecha del tiempo consiste en encontrar como procesos irreversibles pueden explicarse por medio de leyes invariantes frente a reflexión en el tiempo (como se ve, este problema es conceptualmente diferente de la explicación del origen del curso del tiempo” (E. Klein. “What does the “arrow of time” stand for?”, *Natural Science* 2, 212-219, 2010). Se señala además que las diversas propuestas de flecha del tiempo se basan en realidad en una asociación de ideas, pero no en una derivación a partir de una teoría. La propuesta de Ilya Prigogine puede ir en esta dirección ya que el caos a que se refiere es el caos determinista que se deriva de las ecuaciones de Newton. Las leyes de la física en los distintos campos representan la observación de regularidad a través de ecuaciones diferenciales que son invariantes frente a reflexión en

el tiempo. Usualmente pequeñas variaciones dan lugar a resultados (trayectorias) cercanos al original. Sin embargo estas mismas ecuaciones exhiben puntos críticos a partir de los cuales pequeñas variaciones dan lugar a una evolución que difiere notablemente de la considerada regular y una de otra. Como el universo de estas soluciones es mucho mayor que el de las soluciones regulares, Prigogine propone que el caos es lo más común y que la regularidad es la excepción ([Capítulo 25](#)), lo cual fundamenta el desarrollo *inestabilidad* (caos)  $\implies$  *probabilidad*  $\implies$  *irreversibilidad* advocatedo por Ilya Prigogine y por tanto a la flecha del tiempo. Por otra parte, la propuesta de un operador de tiempo, puede ser el inicio de solución a la incompatibilidad señalada entre la mecánica cuántica y la gravedad cuántica, obstáculo en el camino de la integración del microcosmo con el macrocosmo y la flecha del tiempo cosmológica.

El problema del tiempo y su flecha toca todos los campos de la física, y todos los campos de la física pueden aportar a su solución. El tiempo dirá.

#### GLOSARIO

**Caos determinista:** un sistema definido por ecuaciones deterministas no necesariamente tiene una evolución predecible.

**Causa y efecto:** si un evento  $B$  está siempre correlacionado con la existencia de un evento  $A$ , aunque no a la inversa, a  $A$  se denomina causa y a  $B$  efecto.

**Travesti:** La palabra proviene de una modificación hispana del vocablo “transvestite”, persona que de manera voluntaria se coloca vestimenta totalmente opuestas a su sexo.

#### ACRÓNIMOS

**C:** conjugación de carga, i.e.,  $q \Rightarrow -q$ .

**GR:** Gravedad Cuántica: integración de la Mecánica Cuántica con la Relatividad General.

**MC:** Mecánica Cuántica.

**MCR:** Mecánica Cuántica Relativista, integración de la Mecánica Cuántica con la Relatividad Especial.

**P:** inversión espacial, i.e.,  $(x, y, z) \Rightarrow (-x, -y, -z)$ .

**T:** inversión temporal, i.e.,  $t \Rightarrow -t$  más conjugación de números complejos.

PARA SABER MÁS:

- R.P. Feynman, "The distinction of past and future", en *The Character of Physical Law*, MIT Press, Cambridge, MA, (1965)
- J. Zeman, ed., *Time in Science and Philosophy* ed. J. Zeman, Elsevier Publishing Company, 1971.
- I. Prigogine, *From Being to Becoming – Time and Complexity in the Physical Sciences*, W.H. Freeman and Company, 1980.
- L. García-Colín, *Ciento diez años de teoría cinética de los gases*, Rev. Mex. Fis. 28, 121-148, (1982).
- S.W. Hawking, *A Brief History of Time: From the Big Bang to Black Holes*, Bantam Books, 1988; "Historia del tiempo: Del big bang a los agujeros negros". Grijalbo, 1988.
- P. Coveney y R. Highfield, *The Arrow of Time*, Ballantine Books, NY, 1990.
- E. Klein et M. Spiro, eds., *Le Temps et sa Flèche*, Editions Frontières, Paris 1994.
- P. Davies, *La flecha del tiempo*, Rev. Investigación & Ciencia, nov 2002.
- I. Prigogine, *El nacimiento del tiempo*, Ed. Tusquets-Metatamus, Buenos Aires, 2005.
- J.A. Wheeler, *Geons, Black Holes and Quantum Foam: A life in physics*, W. W. Norton & Company, 2010.
- L. Mersini-Houghton y R. Vaas, eds., *The Arrows of Time: A Debate in Cosmology*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012.
- S.W. Hawking, *La teoría del todo - el origen y el destino del universo*, Penguin Random House Grupo Editorial, S.A. de C.V., 2016.
- I. Prigogine, *Las leyes del caos*, Ediciones Culturales Paidós, S.A. de C.V., 2017.

## REFERENCIAS

- [1] G. Muga, R. S. Mayato e I. Egusquiza, eds., *Time in Quantum Mechanics*, 2.<sup>a</sup> ed., ép. Lecture Notes in Physics. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2008.
- [2] G. Muga, A. Ruschhaupt y A. d. Campo, eds., *Time in Quantum Mechanics - Vol. 2*, ép. Lecture Notes in Physics. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2009.
- [3] E. Anderson, «Problem of time in quantum gravity», *Annalen der Physik*, vol. 524, n.º 12, págs. 757-786, 2012.
- [4] W. H. Zurek, «Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical», *Reviews of Modern Physics*, vol. 75, n.º 3, págs. 715-775, mayo de 2003.
- [5] A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda y col., «Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern», *American Journal of Physics*, vol. 57, n.º 2, págs. 117-120, feb. de 1989.
- [6] R. S. Aspden, M. J. Padgett y G. C. Spalding, «Video recording true single-photon double-slit interference», *American Journal of Physics*, vol. 84, n.º 9, págs. 671-677, ago. de 2016.
- [7] J. S. Briggs y J. M. Rost, «On the Derivation of the Time-Dependent Equation of Schrödinger», *Foundations of Physics*, vol. 31, n.º 4, págs. 693-712, abr. de 2001.
- [8] E. Moreva, G. Brida, M. Gramegna y col., «The time as an emergent property of quantum mechanics, a synthetic description of a first experimental approach», *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 626, pág. 012 019, jul. de 2015.
- [9] M. Bauer, «On the problem of time in quantum mechanics», *European Journal of Physics*, vol. 38, n.º 3, pág. 035 402, mar. de 2017.

## EL PRINCIPIO DE RELATIVIDAD

*Jorge Flores Valdés\**

**La primera ley de Newton consta de tres elementos: una definición, un postulado y un principio general, el de relatividad. La definición se refiere a un sistema de referencia inercial, el postulado indica que en la Naturaleza existe un sistema inercial y, finalmente, el principio de relatividad establece que las leyes de la física son las mismas en todos los sistemas inerciales. Es una ley muy general pues es válida no sólo en la física clásica, también lo es en la mecánica cuántica.**

El sistema de referencia es inercial si en él una partícula libre de toda influencia se mueve con velocidad  $v$  constante. Ya que para constatar este hecho necesitamos llevar a cabo experimentos y ello implica poner a la partícula de alguna manera en contacto con los aparatos de medida, parecería que nos enfrentamos a una paradoja al afirmar en el postulado que existe al menos un sistema de referencia inercial en la Naturaleza. Empero, la física es una ciencia experimental y las mediciones conllevan siempre un error, una incertidumbre en la medida. En consecuencia, es posible hallar un marco de referencia inercial  $S$  si la influencia externa produce un cambio en  $v$  menor al error con que se mide la aceleración. Cualquier otro sistema  $S'$  que se mueva con velocidad constante  $V$  respecto a  $S$  también es inercial.

Discutamos ahora el principio de relatividad. Lo primero que debe notarse es que este principio implica la existencia de una velocidad  $c$  que es la máxima para transmitir información. En efecto, para que las ecuaciones de Maxwell obedezcan el principio de relatividad, la velocidad de la luz debe ser independiente del marco de referencia. En este sentido, la constancia de  $c$  no es un postulado independiente. Esto es agradable, pues la propagación instantánea de una señal requiere de energías enormes, de hecho infinitas.

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

Como veremos, del principio de relatividad y una velocidad máxima de propagación obtenemos las ecuaciones de la teoría especial de la relatividad, que Einstein presentó en 1905, el bien llamado año maravilloso de la física. Desde luego, cuando todas las partículas se mueven con velocidades mucho menores que  $c$ , ésta aparenta ser infinita. En consecuencia, la teoría relativista tiende a la newtoniana en el límite  $c \rightarrow \infty$  y se recupera la acción a distancia, un concepto difícil de digerir.

Supongamos, pues, que existe  $c$  medida en  $\mathcal{S}$ . A esta ley le aplicamos el principio de relatividad: si la velocidad  $c$  existe, toma el mismo valor en todos los marcos inerciales. Entonces el tiempo no puede ser ya absoluto. Hemos, de hecho, cambiado un absoluto por otro y tenemos una nueva teoría en la que  $c$  es la velocidad de la luz, pues ésta es la máxima velocidad que se ha medido hasta hoy.

Suponiendo sólo la existencia de  $c$ , se obtiene la transformación de las coordenadas  $(x, y, z, t)$  a las correspondientes  $(x', y', z', t')$  medidas en  $\mathcal{S}'$ . En el caso particular en que  $\mathbf{V}$  esté a lo largo del eje  $X$ , se tiene  $y = y', z = z'$  y además

$$x = \gamma(x' + Vt'), t = \gamma(t' + Vx'/c^2),$$

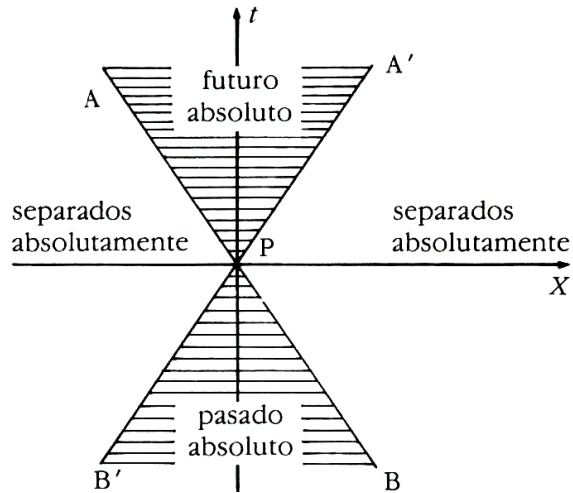
donde  $\gamma^{-1} = \sqrt{1 - V^2/c^2}$ . Cuando  $c \rightarrow \infty$ , estas transformaciones, llamadas de Lorentz, tienden a las de Galileo,

$$x = x' + Vt', t = t',$$

y el tiempo absoluto se recupera.

Muchos resultados sorprendentes surgen de aplicar las transformaciones de Lorentz en vez de las de Galileo. Si medimos una barra de longitud  $l_0$  en reposo en  $\mathcal{S}$  desde el sistema  $\mathcal{S}'$  obtenemos una longitud  $l = l_0\sqrt{1 - V^2/c^2}$ , efecto que se conoce como la contracción de Lorentz. Pensemos en el tiempo propio, colocando un reloj en reposo en  $\mathcal{S}'$  y veamos como cambia un intervalo de tiempo  $\delta t = t_2 - t_1$  en  $\mathcal{S}$ . Se obtiene  $\delta t = \gamma\delta t'$ , y el tiempo propio es menor que el medido respecto a cualquier otro sistema de referencia en el que el cuerpo se mueva. Esta es la dilatación en el tiempo: los relojes en movimiento se ven caminar más despacio que aquellos en reposo. Se siguen también de las transformaciones de Lorentz los conceptos de pasado y futuro absoluto, que se insinúan en la figura 4.1. En las cuatro dimensiones  $(x, y, z, t)$ , las líneas APB y B'PA' determinan el cono de luz, que separa regiones en que P puede afectar un evento (el futuro absoluto) de otros en que no existen relaciones de causalidad.





**Figura 4.1:** Pasado y futuro absolutos.

Es posible, también, obtener cómo se transforman las velocidades, transformación que en la mecánica newtoniana se expresa de manera muy simple:  $\mathbf{v} = \mathbf{v}' + \mathbf{V}$ . En el caso de la relatividad especial, si  $\mathbf{V}$  es paralela al eje  $X$ , todas las componentes de la velocidad se alteran:

$$v_x = (v'_x + V) / (1 + v'_x V/c^2), v_y = (1 - \beta^2) v'_y (1 + v'_x V/c^2)$$

con una expresión análoga para la componente  $z$  de  $\mathbf{v}$ . Aunque  $dy$  no cambia cuando  $\mathbf{V}$  es paralela al eje  $X$ ,  $dt$  sí lo hace. En estas fórmulas  $\beta = V/c$  y en el límite no relativista  $\beta \rightarrow 0$ , y se recuperan las ecuaciones de la mecánica newtoniana.

En la mecánica newtoniana encontramos tres leyes de conservación cuyo carácter es muy general por estar íntimamente ligadas a la estructura del espaciotiempo. Si las condiciones de un sistema mecánico no rompen la homogeneidad del espacio, su momento lineal se conserva; cuando existe invariancia frente a traslaciones en el tiempo, la energía es una constante de movimiento y, finalmente, cuando se respeta la isotropía del espacio, el momento angular se conserva. Con el principio de relatividad de Einstein introducimos un cambio radical en nuestro concepto del espaciotiempo. Ya no habremos de utilizar las transformaciones de Galileo sino las de Lorentz; los cuerpos que se mueven se contraen y los relojes se retrasan si su velocidad respecto al observador no es nula. Es natural, entonces, sospechar que las definiciones que antes usamos para el momento lineal y la energía

sufran cambios sustanciales.

En el caso del momento lineal se obtiene  $\mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v}$ , que se reduce al valor newtoniano si  $\beta \rightarrow 0$  o  $\gamma \rightarrow 1$ . Con  $\mathcal{E} = mc^2 \gamma$  y el momento lineal se puede generar una invariante relativista. Por ello, es interesante averiguar a qué corresponde  $\mathcal{E}$ . Para lograrlo desarrollamos  $\gamma$  en potencias de  $\beta$ ; a segundo orden se tiene

$$mc^2 \gamma = mc^2 + mv^2/2$$

y aparece la energía cinética newtoniana. Cuando  $v = 0$ ,  $\mathcal{E}$  se reduce a  $mc^2$ , la llamada energía en reposo. Esto difiere de lo que ocurriría en el límite newtoniano en que la energía se anula cuando la partícula no se mueve. He aquí la famosa relación entre masa y energía, la cual sin duda es la ecuación de la física moderna que mejor conoce el público.

Si definimos el cuadrimomento  $p_i$  con  $i = 1, 2, 3, 4$  siendo  $\mathcal{E}$  la componente temporal y el momento lineal  $\mathbf{p}$  la componente espacial, resulta natural generalizar la segunda ley de Newton en la forma  $f_i = dp_i/d\tau$ , con  $\tau$  el tiempo propio, pues cuando  $c \rightarrow \infty$  esta ecuación se reduce a  $\mathbf{f} = m\mathbf{a}$ . Atestiguamos así que la segunda ley sufre su primera caída ante el embate relativista. Empero, el principio de relatividad ha quedado a salvo. Lo mismo ocurre en la formulación cuántica: la segunda ley de Newton debe cambiarse drásticamente, pero la primera ley queda incólume.

La ecuación de Schrödinger es claramente no relativista. En efecto, en la expresión cuántica para la energía cinética aparecen segundas derivadas respecto a las coordenadas espaciales, pero el hamiltoniano opera sobre la función de onda como la primera derivada respecto al tiempo. Se tratan, pues, al tiempo y al espacio de manera diferente. En consecuencia, la ecuación de Schrödinger no es invariante frente a la transformación de Lorentz.

A lo largo del Siglo XX se han realizado muchos esfuerzos para crear la mecánica cuánticorelativista, pero sin las teorías de campo este matrimonio no ha resultado bien avenido. Podría tal vez pensarse que la mecánica cuántica, con su principio de incertidumbre y la incorporación del observador, es incompatible con las exigencias de un sistema inercial de referencia, donde se concibe a la partícula alejada de todo instrumento.

Para tratar con partículas muy rápidas debemos lograr que las ecuaciones cuánticas sean invariantes ante las transformaciones de Lorentz. Seguimos aquí lo que Dirac, el originador de la primera teoría cuántico-relativista, presenta en su maravilloso libro *The Principles of Quantum Mechanics*. Lo primero que introducimos es la notación  $x_\mu$ ,  $\mu = 0, 1, 2, 3$  y donde  $x_0 = ct$ .

Entonces, el operador correspondiente al momento lineal se escribe como

$$p_\mu = i\hbar\partial/\partial x^\mu.$$

Veamos el caso de un electrón libre, en ausencia de un campo electromagnético. El hamiltoniano relativista es

$$H = c(m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{1/2}$$

y nos conduce a la ecuación de onda

$$\{p_0 - (m^2c^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2)^{1/2}\}\psi = 0,$$

que no es simétrica entre el tiempo y el espacio. Si multiplicamos esta ecuación por el factor

$$\{p_0 - (m^2c^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2)^{1/2}\}$$

se puede obtener una ecuación relativista. Por desgracia, en ella aparece el factor  $p_0^2$ , lo cual contradice principios fundamentales de la mecánica cuántica. Dirac propuso entonces una ecuación lineal en  $p_i$  de la forma

$$\{p_0 - \alpha_1 p_1 - \alpha_2 p_2 - \alpha_3 p_3 - \eta\}\psi = 0.$$

En el caso de la partícula libre las  $\alpha_i$  y la  $\eta$  no dependen de  $x_i$ , por lo que describen un nuevo grado de libertad, que es el espín. Si escribimos  $\eta = \alpha_m mc$ , vemos que las cuatro  $\alpha_\mu$  anticonmutan y que su cuadrado es la unidad. Esto da origen a las famosas matrices de Dirac y la invariancia relativista se recupera.

Es conveniente escribir las  $\alpha_i$  en la forma

$$\alpha_1 = \rho_1\sigma_1, \alpha_2 = \rho_1\sigma_2, \alpha_3 = \rho_1\sigma_3, \alpha_m = \rho_3,$$

que entonces satisfacen la relación de anticonmutación. Si se toma una representación matricial en la que  $\rho_3$  y  $\sigma_3$  sean diagonales, obtenemos las siguientes matrices de  $4 \times 4$ :

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} & \sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \rho_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \rho_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} & \rho_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Con esta notación, la ecuación de Dirac se puede escribir utilizando vectores tridimensionales en una forma en la que es fácil introducir la interacción electromagnética. La ecuación es:

$$\{p_0 - \rho_1 (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}) - \rho_3 mc\} \psi = 0$$

y para introducir el campo electromagnético hacemos lo usual: reemplazamos  $p_0$  por  $p_0 + (e/c) A_0$  y  $\mathbf{p}$  por  $\mathbf{p} + (e/c) \mathbf{A}$ . Se obtiene la ecuación fundamental de la teoría relativista de una partícula cargada,

$$\left\{ p_0 + \frac{e}{c} A_0 - \rho_1 \left( \vec{\sigma} \cdot \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) - \rho_3 mc \right\} \psi = 0.$$

Podemos resumir lo dicho hasta aquí postulando que cualquier ley de la física debe poder expresarse como una relación geométrica independiente del marco de referencia entre objetos que también sean geométricos e independientes del marco de referencia. Esto es válido en la física newtoniana, en la relatividad especial y aun en la relatividad general. Lo que caracteriza a cada una de estas teorías es la geometría de la arena en que ocurren los eventos. En la física newtoniana la arena es un espacio euclidiano tridimensional, en la relatividad especial se emplea el espaciotiempo como un espacio tetradimensional de Minkowski y en la relatividad general se emplea un espacio curvo, como se describe en el [Capítulo 6](#).

PARA SABER MÁS:

- Goldstein H., Poole C., Safko J., *Classical mechanics*, Addison Wesley, EUA, 2002.
- José J., Saletan E., *Classical Dynamics*, Cambridge University Press, E.U.A, 1998.
- Hestenes D., *Foundations for Classical Mechanics*, Kluwer Academic Publishers, Holanda, 1986.

## LOS PRINCIPIOS VARIACIONALES

*Jorge Flores Valdés\**

**El uso de superlativos nos proporciona una forma sencilla de expresar muchas leyes físicas. Un principio variacional, que es la formulación matemática de los superlativos, es en ocasiones el principio de la investigación teórica; otras veces es el final del trabajo, pero en todo caso puede sugerir las relaciones entre un gran número de campos de la física. En este capítulo, presentaremos los principios variacionales en la mecánica clásica, en la física relativista, en la óptica, la mecánica cuántica y la teoría de campos.**

En geometría con los superlativos se pueden definir en forma simple algunas entidades geométricas:

- a) La línea recta es la distancia más corta entre dos puntos.
- b) La circunferencia es la curva más corta que encierra un área dada.
- c) La esfera es la superficie con la menor área que contiene un volumen dado.

Por otro lado, en la física los superlativos también son muy útiles. Presentamos tres ejemplos:

- a) La corriente eléctrica se distribuye en un circuito eléctrico de tal forma que el calor generado sea mínimo.
- b) Los potenciales termodinámicos toman un valor máximo (o mínimo) en la situación de equilibrio.

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

- c) La luz recorre el mínimo camino óptico, lo que se conoce como principio de Fermat.

El superlativo se expresa matemáticamente, en general, pidiendo que la integral de alguna función  $L$  típica del sistema tome, para el comportamiento real del sistema, un valor mayor (o menor) que para cualquier otro comportamiento posible. La función  $L$  depende de los parámetros del sistema  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, s$ , de las funciones de coordenadas del sistema  $\varphi_i$ ,  $i = 1, \dots, r$ , y de sus derivadas  $\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_j} = \varphi_{ij}$ . Para obtener las ecuaciones que gobiernan al sistema, se debe obtener un extremo de la integral

$$\mathcal{L} = \int L(\varphi_i, \varphi_{ij}, x_i) dx_1 \cdots dx_s \quad (5.1)$$

para muchas ramas de la física, al minimizar  $\mathcal{L}$  bajo condiciones muy generales se obtienen las ecuaciones diferenciales fundamentales que determinan  $\varphi_i$ .

Los principios variacionales juegan un doble papel en la física teórica. Por un lado, proporcionan una formulación exacta de las leyes que rigen a los sistemas en muchos campos; de analizarlos se evidencian las analogías entre campos diferentes de la física. Por otro lado, nos aportan un punto de partida para resolver las ecuaciones en forma aproximada. Hay físicos que no gustan de estos principios, pues opinan que no contienen nueva física y que rara vez simplifican la solución práctica de un problema. Empero, a otros científicos les encantan porque dan el punto de partida para nuevas formulaciones. En todo caso, los principios variacionales son bellos y resaltan, como ya dijimos, ese valor inapreciable en las ciencias físicas: su unidad conceptual.

Veamos primero el caso de la mecánica clásica. Las ecuaciones de Lagrange se pueden obtener de un principio diferencial como el de D'Alembert o del principio de mínima acción, también llamado de Hamilton:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (T - V) dt = 0 \quad (5.2)$$

en donde  $T$  es la energía cinética y  $V$  la potencial, y el tiempo  $t$  juega aquí el papel de un parámetro. Tanto  $T$  como  $V$  deben ser invariantes frente a transformaciones de coordenadas para que el principio variacional tenga validez general. El teorema inverso es válido: si se cumplen las ecuaciones de Lagrange el principio de Hamilton también se cumple. Si en lugar

del espacio de configuraciones se utiliza el espacio de las fases, del principio variacional obtenemos las ecuaciones de Hamilton en vez de las de Lagrange. Para obtener las ecuaciones de movimiento, se han considerado variaciones, pequeñas y arbitrarias, respecto a la solución exacta del movimiento, y se exige que el cambio a primer orden en la integral se anule.

Las simetrías que presenta un sistema formado por  $n$  partículas restringen la forma de las funciones características del sistema. En particular, si se impone invariancia frente al grupo de Galileo, se obtiene la forma del hamiltoniano  $H = T + V$ . Esto, además de ser interesante, es importante, ya que es el razonamiento que se sigue en la física moderna para determinar las ecuaciones de movimiento, suponiendo que el sistema debe ser invariante frente a ciertas transformaciones, dictadas por consideraciones de carácter muy general. Si se pide que  $H$  sea invariante frente a traslaciones en el espacio se sigue la conservación del momento lineal; en el caso de la invariancia frente a rotaciones, se obtiene que el momento angular permanece constante. Cuando se da la invariancia frente a traslaciones en el tiempo, se deduce la conservación de la energía. Si se impone la invariancia frente al grupo de Galileo se concluye que el potencial depende únicamente de la magnitud de las distancias y velocidades relativas.

Consideremos ahora lo que ocurre en la mecánica relativista. Para ello en vez de las transformaciones de Galileo utilizaremos las de Lorentz, que implican que la velocidad de la luz  $c$  es invariante al pasar de un sistema de referencia inercial a otro. En tal caso, para una partícula libre y muy rápida, el principio variacional relativista exige que el tiempo propio  $\tau$  sea un extremo, pues éste es el único invariante relativista. Cuando la velocidad de la partícula libre es mucho menor que  $c$ , la diferencial de  $\tau$  es proporcional a la energía cinética  $T$  y se recupera el principio variacional de la ecuación (5.2) con  $V = 0$ .

A continuación presentaremos los principios variacionales en la óptica y en la mecánica ondulatoria. Empezamos por establecer el principio de Huygens que consiste en lo siguiente: en cada punto de un frente de onda se produce una fuente de luz que emite una onda esférica de velocidad  $u = c/n(\mathbf{r})$ , donde  $n$  es el índice de refracción del medio, que puede depender del punto  $\mathbf{r}$ . Así se genera un frente de onda que progresa. Si  $\chi(\mathbf{r})$  es una función que toma un valor constante sobre cada uno de los frentes de onda y es igual al tiempo que le toma a la señal llegar desde una superficie sobre la cual  $\chi$  se pone arbitrariamente igual a cero, se obtiene que  $|\nabla\chi|^2 = c^2/n^2$ , ecuación que coincide con la de Hamilton-Jacobi si el índice de refracción se toma igual a  $n = c\sqrt{2m(E - V)}$ . Así se establece una analogía formal entre

la dinámica clásica y la óptica geométrica. Reforzamos esta analogía usando el principio de Fermat, que indica que de todas las posibles trayectorias que un rayo de luz pueda cursar, éste sigue la que requiere el menor tiempo de recorrido. Con este valor del índice de refracción, obtenemos el principio variacional que ya utilizamos en mecánica relativista.

La relación entre la mecánica de una partícula y la óptica geométrica se robustece al considerar el principio variacional de Maupertuis, el cual se usa, cuando la energía se conserva, para obtener la trayectoria que sigue la partícula. Ahora se consideran variaciones más limitadas que antes, pues sólo se permiten aquéllas en donde la energía se conserve. Esto conduce a la siguiente expresión del principio de mínima acción, que para una partícula de masa  $m$  sujeta al potencial  $V$  se convierte en:

$$\delta \int \sqrt{2m(E - V)} dl = 0, \quad (5.3)$$

donde  $dl$  es la diferencial de trayectoria. Para el movimiento libre,  $V = 0$  y la condición (5.3) nos da el resultado trivial: la partícula sigue una trayectoria recta, pues éste es el camino más corto. Por otro lado, el principio de Fermat para la óptica geométrica toma la misma forma (5.3) pero ahora en vez del momento lineal se utiliza el vector de onda  $\mathbf{k}$ . Vemos que lo análogo para la partícula libre se da para los rayos de luz que viajan en el vacío: se propagan a lo largo de una línea recta.

Discutiremos ahora lo concerniente a los principios variacionales de la teoría electromagnética. Empecemos con una carga eléctrica  $e$  en un campo dado. Éste se caracteriza por un cuadrivector  $A_i = (\mathbf{A}, \phi)$ ,  $i = 1, 2, 3, 4$ , y con él se puede formar un invariante relativista, haciendo el producto escalar de este cuadrivector con otro que caracteriza el desplazamiento  $dx_i$  en el espacio de cuatro dimensiones. Así, al tiempo propio debemos agregar el producto  $(e/c) \sum_i A_i dx_i$ . De la ecuación de Lagrange surge entonces la ecuación de movimiento de la carga  $\dot{\mathbf{p}} = e\mathbf{E} + (e/c) \mathbf{v} \times \mathbf{B}$ , donde aparece la fuerza de Lorentz; el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  y el campo magnético  $\mathbf{B}$  se obtienen derivando el cuadrivector  $A_i$ . De este principio variacional, que es incompleto pues las cargas no sólo sienten el efecto de los campos sino que también los afectan, surgen sólo dos de las ecuaciones de Maxwell, las que fijan la divergencia de  $\mathbf{B}$  y el rotacional de  $\mathbf{E}$ . Falta añadir a la acción un término que sólo dependa del campo y no de las partículas. Este término debe ser un invariante de Lorentz y conducir a ecuaciones que sean lineales. Solamente existen dos combinaciones de  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{B}$  que satisfagan ambos requisitos:  $E^2 - B^2$  y  $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$ . Ya que el producto escalar es un pseudoescalar,



no puede aparecer en el principio variacional. La acción del campo es entonces proporcional a  $E^2 - B^2$ . Ahora sí obtenemos del principio variacional completo las dos ecuaciones de Maxwell faltantes.

Vayamos ahora a la mecánica cuántica. La ecuación de Schrödinger  $H\psi = E\psi$ , donde  $H$  es el operador hamiltoniano y  $E$  la energía de un estado estacionario, puede obtenerse también de un principio variacional donde se busca un extremo para la integral  $\int \psi^* H \psi dq$  sujeta a la condición de normalización de la función de onda. Variando  $\psi(q)$ , al obtener el mínimo de la integral se encuentra la función del estado base. Los siguientes estados excitados se consiguen buscando un extremo de la integral pero con la condición de que la nueva función de onda sea ortogonal a las obtenidas antes. Diversos resultados se siguen directamente del principio variacional. Si excluimos el caso de partículas idénticas, se sigue que la función del estado base no tiene nodos y que este estado no es degenerado. En particular, ninguno de los niveles de un espectro discreto en movimiento unidimensional es degenerado y las funciones de onda presentan cada vez más nodos. A medida que se amplía el espacio de las funciones de prueba los niveles de energía deben disminuir.

Expondremos ahora el método variacional de Rayleigh-Ritz, que nos permite obtener valores aproximados para los eigenvalores de una ecuación como la de Schrödinger en que  $H$  es un operador hermitiano. Pensemos en un conjunto completo de  $n$  funciones de prueba  $\phi_i$ , que por alguna razón están a nuestro alcance. Calculamos la matriz cuyos elementos son  $H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle$ , la diagonalizamos y obtenemos  $n$  eigenvalores  $E_{\mu_1}, \dots, E_{\mu_n}$ , que se aproximan a los exactos. Rayleigh y Ritz establecieron que si uno agrega la función de prueba  $\phi_{n+1}$  y diagonaliza la matriz de  $H$  con dimensión  $n + 1$ , se obtienen los eigenvalores  $\mathcal{E}_1, \dots, E_n, \mathcal{E}_{n+1}$ , con la propiedad

$$\mathcal{E}_1 \leq E_{\mu_1} \leq \mathcal{E}_2 \leq E_{\mu_2} \leq \dots \leq \mathcal{E}_n \leq E_{\mu_n} \leq \mathcal{E}_{n+1}. \quad (5.4)$$

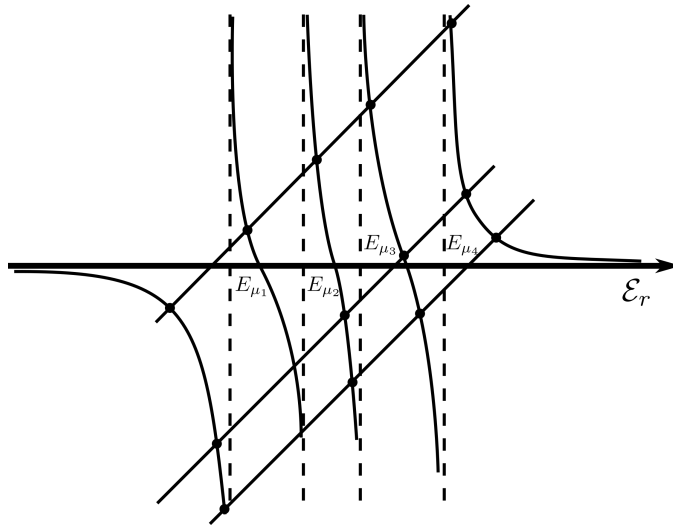
Si se usa la base de funciones que diagonalizan la matriz original de dimensión  $n$ , la ecuación de eigenvalores toma la forma

$$\begin{bmatrix} E_{\mu_1} & 0 & 0 & \dots & 0 & v_1 \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & 0 & E_{\mu_i} & \dots & 0 & v_i \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & E_{\mu_n} & v_n \\ v_1^* & \dots & v_i^* & \dots & v_n^* & E_\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^{(r)} \\ \vdots \\ c_i^{(r)} \\ \vdots \\ c_n^{(r)} \\ 1 \end{bmatrix} = \mathcal{E}_r \begin{bmatrix} c_1^{(r)} \\ \vdots \\ c_i^{(r)} \\ \vdots \\ c_n^{(r)} \\ 1 \end{bmatrix}$$

y la ecuación que se obtiene al eliminar las constantes  $c_i$  es

$$\sum_{i=1}^n \frac{|v_i|^2}{\mathcal{E}_r - E_{\mu_i}} = \mathcal{E}_r - E_\lambda \quad (5.5)$$

cuya solución gráfica se presenta en la figura 5.1.



**Figura 5.1:** Solución gráfica de la ecuación (5.5) para los tres casos,  $E_\lambda > E_{\mu_n}$ ,  $E'_\lambda$  en el intervalo de las  $E_\mu$  y  $E''_\lambda$ .

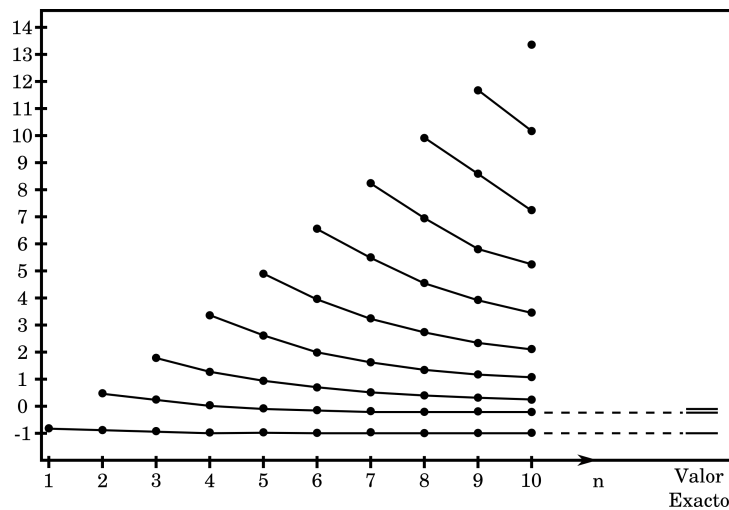
En la figura 5.2 se presenta un ejemplo de aplicar este método variacional. Calculamos el problema de Coulomb utilizando como funciones de prueba las de un oscilador armónico unidimensional. Vemos cómo al aumentar  $n$  los eigenvalores aproximados tienden a los exactos.

En general se pueden plantear lagrangianos de muy distintos tipos. Por ejemplo, considérese

$$L = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^m \sum_{\nu=1}^m g_{\mu\nu} \frac{\partial\psi}{\partial x_\mu} \frac{\partial\psi}{\partial x_\nu} + \frac{1}{2} \lambda \psi^2 + f\psi \quad (5.6)$$

donde  $\lambda$ ,  $f$  y  $g_{\mu\nu}$  son funciones de todas las coordenadas  $x_1, \dots, x_m$ . En el caso particular en que la función  $g_{\mu\nu}$  sea la función delta de Kronecker, se incluyen muchos casos como se muestra en la siguiente tabla:

$m$	$\lambda$	$f$	Ecuación
3	0	0	Laplace
3	0	arbitraria	Poisson
3	$-k^2$	0	Helmholtz
4	0	0	ondas
4	$(m_0c/\hbar)^2$	0	Klein-Gordon



**Figura 5.2:** Eigenvalores de la matriz  $n \times n$  para el hamiltoniano coulombiano usando funciones de prueba de oscilador armónico. El valor de  $n$  se cambia de 1 a 10 y la energía se da en unidades de la primera órbita de Bohr.

Hemos visto cómo los principios variacionales nos permiten formular con el mismo lenguaje las ecuaciones que rigen muy diversos sistemas físicos. También hemos indicado cómo estos principios variacionales se utilizan para obtener resultados aproximados.

PARA SABER MÁS:

- Moiseiwitsch B. L., ***Variational Principles***, Dover Publications, E. U. A., 2004.
- Morse P. M. y Feshbach H., ***Methods of Theoretical Physics***, McGraw-Hill, E.U.A., 1953.
- Landau L. D. y Lifshitz E. M. ***Course of Theoretical Physics Vols. 1, 2 y 3***, Pergamon Press, United Kingdom, 1958.
- C. Lanczos, ***The variational principles of mechanics***, Dover Books on Physics, 464 pp., 1986.
- Feynman, R., “Cap. 19: The Principle of Least Action”, en ***The Feynman Lectures on Physics, Definitive Edition***, Vol. 2, Addison-Wesley Publishing Co., Estados Unidos, 1963.

## EL PRINCIPIO DE EQUIVALENCIA Y LA RELATIVIDAD GENERAL

*Shahen Hacyan\**

**Según el principio de equivalencia débil, todos los cuerpos sujetos a una fuerza gravitacional, independientemente de sus masas, se mueven con la misma aceleración en un campo gravitacional. En su versión fuerte, el principio estipula que las leyes de la física son localmente las mismas en cualquier sistema de referencia en caída libre. Este principio fue fundamental para elaborar la teoría de la relatividad general.**

Cuenta una famosa leyenda que Galileo Galilei subió a lo alto de la torre de Pisa para soltar desde allí dos piedras, una más pesada que la otra, y comprobó que las dos caían exactamente en el mismo tiempo. Así refutaba lo que se pensaba hasta su época: que los cuerpos pesados caen más rápidamente que los ligeros. En realidad, la anécdota se debe a un discípulo de Galileo que la incluyó en una biografía póstuma de su maestro, pero se sabe actualmente que carece de veracidad [1]. Y es que el mismo Galileo mencionó el experimento en sus escritos, pero afirmó explícitamente que nunca lo realizó por la simple razón de que no era necesario; según él, el resultado se podía deducir a partir de un simple argumento lógico.

En esencia, el argumento que presenta Galileo en su bien conocido *Diálogo concerniente a dos nuevas ciencias* consiste en el siguiente experimento mental: Supongamos que dos cuerpos de pesos distintos se dejan caer desde cierta altura. Si el cuerpo más pesado cayera con mayor rapidez que el ligero, tendría que llegar primero al suelo. Pero supongamos que los dos cuerpos están amarrados con una cuerda. En este caso, el cuerpo más ligero retrasaría la caída del más pesado y, por lo tanto, los dos caerían más lentamente que si se tratara de un solo cuerpo con la masa de los dos; así, se llegaría a la conclusión absurda de que un cuerpo cae más rápidamente que

---

\*Departamento de Física Cuántica y Fotónica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

sus partes. La contradicción, según Galileo, sólo se evitaría aceptando que todos los cuerpos caen de la misma forma, sin importar su peso.

El argumento parece muy ingenioso, pero contiene una importante falla: no toma en cuenta que la cuerda que une los dos cuerpos sufre una tensión. En realidad, el argumento de Galileo también tendría que aplicarse a la fuerza eléctrica, pero no hay ningún principio de equivalencia para las cargas eléctricas (ver [2] para más detalles).

#### MASA INERCIAL Y MASA GRAVITACIONAL

Se suele confundir a menudo dos conceptos que, en principio, no deberían tener ninguna relación entre sí: masa inercial y masa gravitacional. Sin embargo, por alguna razón aún no bien entendida, están estrechamente relacionados por el principio de equivalencia. Veamos a continuación por qué este principio no es tan obvio como creía Galileo.

La *masa inercial*,  $m_i$ , aparece en la segunda ley de Newton,  $F = m_i a$  ( $a$ : aceleración), y es una medida de la inercia con la que un cuerpo se opone a la fuerza que se le aplica. A mayor masa inercial, menor aceleración producida por una misma fuerza, y viceversa. Hasta aquí, nada que ver con la gravitación.

La *masa gravitacional* aparece en la ley de Newton de la gravitación universal, la cual estipula que la fuerza de atracción entre dos cuerpos de masas gravitacionales  $M_g$  y  $m_g$  está dada por  $GM_g m_g / R^2$ , donde  $R$  es la distancia entre los dos cuerpos y  $G$  la llamada constante de Newton. En realidad, la masa gravitacional sería más bien una *carga gravitacional*, en analogía con la fuerza de Coulomb que tiene la misma forma.

Ahora bien, la fuerza gravitacional de un cuerpo de masa gravitacional  $M_g$ , la Tierra por ejemplo, sobre un cuerpo de masa gravitacional  $m_g$ , es  $F = m_i a$ , lo cual implica que la aceleración  $a$  de ese cuerpo es proporcional a la razón  $m_g / m_i$ . Pero, por el principio de equivalencia, esta razón es la misma para todos los cuerpos. La masa inercial es estrictamente proporcional a la masa gravitacional. Tan es así que se puede fijar la constante de proporcionalidad  $m_g / m_i = 1$  y, sin perder generalidad, hablar de masa indistintamente de si es inercial o gravitacional.

Para ver que el principio de equivalencia es una peculiaridad de la fuerza de gravedad exclusivamente, imaginemos un “planeta” con carga eléctrica positiva  $Q$  en el cual los cuerpos “caen” por estar cargados negativamente. En este caso, la fuerza ejercida sobre un cuerpo con carga  $q$  será, según la ley de Coulomb,  $m_i a = qQ / R^2$ , donde  $m_i$  es la masa inercial del

cuerpo. Evidentemente, al no haber ninguna relación entre carga eléctrica y masa inercial, la aceleración será distinta para cada cuerpo, dependiendo del valor de  $q/m_i$ . Incluso cabe la posibilidad de que un cuerpo no esté cargado, por lo que no “caería” en el planeta, o que tenga carga positiva y sea repelido. En el caso de la gravedad, por el contrario, no se puede “cargar” o “descargar” gravitacionalmente un cuerpo sin cambiar su masa inercial exactamente en la misma proporción. Existe una estricta proporcionalidad entre masa inercial y lo que sería la “carga gravitacional”.

Isaac Newton estuvo plenamente consciente de lo que significaba la estricta proporcionalidad entre masa inercial y masa gravitacional. Tal como lo narra en la sección dedicada a las leyes de movimiento de los *Principia*, realizó una serie de experimentos para comprobar este principio: puso a oscilar varios péndulos de materiales diversos y comprobó que el movimiento no dependía del material.

Una versión más refinada del experimento de los péndulos se debe al Barón Roland Eötvös. Los experimentos clásicos que realizó Eötvös a partir de 1890 se basaron en el hecho de que un cuerpo masivo sobre la superficie de la Tierra está sujeto a dos fuerzas vectoriales en direcciones distintas: la fuerza de gravedad que lo atrae al centro del planeta y la fuerza centrífuga debido a la rotación terrestre, perpendicular al eje de rotación. La primera es proporcional a la masa gravitacional, mientras que la segunda es proporcional a la masa inercial. Evidentemente la primera domina por amplio margen, pero la segunda produce una ligera desviación con respecto a la vertical. En el experimento original, Eötvös utilizó una balanza de torsión con dos masas de materiales distintos en cada extremo; cualquier pequeña diferencia debido a una desigualdad entre masa inercial y gravitacional produciría una torca que se notaría, después de un tiempo suficiente, por una rotación de la balanza. Con este experimento, Eötvös concluyó que no había diferencia entre masa inercial y gravitacional con una precisión de al menos una parte en 20 millones [3]. El experimento se ha repetido de diversas formas a lo largo del siglo XX, refinando cada vez más la precisión de los datos, y hasta la fecha no se ha encontrada ninguna evidencia de que el principio de equivalencia se pudiera violar [4].

Ernst Mach, en su obra clásica, *Los principios de la mecánica*, criticó fuertemente los conceptos de espacio y tiempo absolutos de Isaac Newton. Para Mach el espacio absoluto era un ente metafísico que no podía servir de sistema de referencia. Más bien, el movimiento de un cuerpo debía referirse al sistema formado por todos los demás cuerpos del Universo. Como es bien sabido, Albert Einstein se inspiró en la crítica de Mach para elaborar

su teoría de la relatividad y desechar definitivamente el espacio y el tiempo absolutos de la física newtoniana. Como veremos a continuación, Einstein se basó justamente en el principio de equivalencia para formular su teoría de la relatividad general. En particular, retomó la tesis de Mach de que los cuerpos distantes son los que forman un sistema de referencia válido y propuso lo que se conoce ahora como “principio de Mach” (aunque Mach nunca lo formuló en esos términos). Según este principio, la masa inercial se debería a la acción gravitacional de todas las masas en el Universo, lo cual explicaría, al menos en principio, la estrecha relación entre estos dos conceptos aparentemente tan disímiles. Hay que aclarar, sin embargo, que este principio no se puede deducir de la teoría que elaboró Einstein; por ejemplo, sus ecuaciones admiten como solución exacta un universo totalmente vacío en el que dos partículas de prueba se mueven alejándose una de la otra (el universo de De Sitter). Por otra parte, hasta la fecha no se ha podido comprobar experimentalmente esta hipótesis; por ejemplo, los intentos de detectar alguna variación de la inercia con respecto a la distribución de materia en nuestra galaxia han tenido resultados negativos [5].

Más recientemente ha habido intentos de explicar el principio de equivalencia a partir de razonamientos teóricos. Por ejemplo, Weinberg [6] mostró en 1964 que la equivalencia entre masa inercial y gravitacional resulta como una condición necesaria y suficiente para la consistencia de la llamada teoría de la matriz  $S$ , una teoría de partículas elementales que despertó cierto interés en los sesentas. Más recientemente, Verlinde [7] propuso deducir ese principio a partir de un “principio holográfico”... Pero en todos los casos se trata de deducciones basadas en postulados puramente matemáticos, cuya justificación física no es evidente ni clara.

## RELATIVIDAD ESPACIAL Y GENERAL

Para ilustrar las ideas de Einstein que le permitieron formular la teoría de la relatividad general, empecemos primero con la relatividad especial, que es una teoría diseñada para sistemas inerciales en las que no hay gravedad (ver también el [Capítulo 4](#) del presente libro). Como es bien sabido, Einstein presentó en 1905 la teoría especial, cuyo postulado fundamental era que las leyes de la física (incluyendo, muy especialmente, las del electromagnetismo formuladas por Maxwell) tienen la misma forma en cualquier sistema de referencia inercial. Se puede pasar de un sistema de referencia a otro por medio de una transformación de Lorentz, sin cambiar la forma de estas leyes. En particular, la velocidad de la luz (en el vacío) es la misma



en cualquier sistema, independientemente de cómo se mueva, y es, por lo tanto, una constante universal.

Un concepto fundamental de la relatividad especial es el espacio-tiempo de cuatro dimensiones, conocido como espacio de Minkowski. En este espacio, cada punto es un evento definido por cuatro coordenadas: las tres coordenadas espaciales del lugar donde ocurre el evento y el tiempo al que ocurre, interpretado éste como una cuarta coordenada. La “distancia” infinitesimal entre dos eventos  $x^\mu$  y  $x^\mu + dx^\mu$  se mide de acuerdo con la fórmula (en coordenadas cartesianas)

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2, \quad (6.1)$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz. La distancia así definida se puede interpretar como una generalización del teorema de Pitágoras, y es invariante ante transformaciones de Lorentz, de la misma forma como, en geometría, la distancia entre dos puntos no depende del sistema de coordenadas que se utilice.

El problema de cómo generalizar la teoría de la relatividad para incluir fuerzas inerciales mantuvo ocupado a Einstein durante varios años hasta que, en sus propias palabras, tuvo “el pensamiento más feliz de mi vida”:

“para un observador que cae libremente del techo de una casa no hay —al menos en su entorno inmediato— campo gravitacional” [8].

A partir de esta simple constatación, Einstein concibió una interpretación de la gravedad en términos geométricos. Notó que en el entorno infinitesimal del observador en caída libre, el espacio-tiempo debe ser plano, es decir, deber ser el espacio-tiempo de Minkowski. Esto recuerda el hecho de que la superficie de la Tierra parece plana en una escala pequeña, pero su curvatura se pone de manifiesto a gran escala. Esta analogía condujo a Einstein a proponer que el espacio-tiempo de cuatro dimensiones, a gran escala, es un espacio-tiempo curvo. La trayectoria seguida por un observador en caída libre, en su entorno inmediato, parecerá una recta en un espacio-tiempo de Minkowski. Sin embargo, en un espacio curvo, el concepto de recta debe generalizarse al de *geodésica*, que es la curva de mínima longitud entre dos puntos dados.

Siguiendo con la analogía de la superficie terrestre, la geodésica entre dos puntos situados sobre ella es un segmento de arco máximo que parece una recta a pequeña escala. Más aún, dos geodésicas que parezcan rectas paralelas, si se prolongan lo suficiente, acabarán por unirse. El concepto de paralelas no se aplica a espacios curvos.

De acuerdo con la interpretación de Einstein, el espacio-tiempo se curva debido a la presencia de materia y energía, y esa curvatura es la que se manifiesta como un campo gravitacional. Así, la trayectoria seguida por un cuerpo en caída libre será una geodésica en un espacio-tiempo curvo. Además, dos observadores en caída libre hacia el centro de la Tierra notarán que se están acercando el uno al otro, de la misma forma como dos caminantes que sigan trayectorias inicialmente paralelas sobre la Tierra empezarán a acercarse si caminan lo suficiente.

Bernard Riemann (1826–1866) desarrolló el formalismo matemático para estudiar espacios curvos de cualquier número de dimensiones. La geometría riemanniana, junto con el cálculo tensorial, resultó ser la herramienta ideal para la teoría de la gravitación de Einstein. En general, un espacio-tiempo riemanniano se puede definir por medio de la fórmula para medir distancias entre dos puntos de ese espacio:

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu,$$

donde  $g_{\mu\nu}$  es el llamado *tensor métrico*, que se puede interpretar como una matriz simétrica de 4 por 4; más precisamente, se trata de un tensor de rango 2, siendo el rango el número de índices (utilizamos la convención de Einstein de sumar sobre índices repetidos). La trayectoria entre dos puntos mide, en general,  $\int ds$  y la geodésica entre esos dos puntos es la curva que minimiza la distancia. Para un espacio-tiempo de Minkowski se tiene simplemente  $g_{00} = 1$ ,  $g_{a0} = 0$  y  $g_{ab} = -\delta_{ab}$  ( $a, b = 1, 2, 3$ ), que se reduce a la fórmula (6.1). Si se trata de un campo gravitacional, el tensor métrico tendrá una forma más general, que estará dada por la distribución de materia y energía, como veremos a continuación.

#### ECUACIONES DE CAMPO

La gran idea de Einstein fue concebir que las ecuaciones que describen el movimiento de una partícula en un campo gravitacional son formalmente las mismas que las ecuaciones de las geodésicas en un espacio-tiempo riemanniano. Para seguir con la analogía, hay que relacionar la curvatura del espacio-tiempo con una distribución dada de masa y energía. Para ello, recordemos que, en mecánica newtoniana, el potencial por unidad de masa,  $\Phi$ , está dado por la ecuación de Poisson que relaciona ese potencial con la distribución de masa  $\rho$ . Se trata de una ecuación diferencial de segundo orden en  $\Phi$ . A partir de razonamientos lógicos, Einstein llegó a la conclusión de que la generalización de esta ecuación debe ser una ecuación tensorial de

rango 2, que relacione las segundas derivadas del tensor métrico  $g_{\mu\nu}$  con la distribución de materia y energía. Así, Einstein propuso una ecuación con estas propiedades y que se reduce a la ecuación de Poisson en el límite de campos gravitacionales débiles y velocidades no relativistas (véase [9] para detalles).

La ecuación de Einstein es, en realidad, un conjunto de 10 ecuaciones diferenciales de segundo orden, altamente no lineales, para las 10 componentes del tensor  $g_{\mu\nu}$ . A diferencia de la gravitación newtoniana o el electromagnetismo, cuyas ecuaciones de campo son lineales, una solución general de las ecuaciones de Einstein es imposible de obtener debido a su no-linealidad. Es sólo en la aproximación de campo gravitacional débil que se pueden linealizar estas ecuaciones. En su artículo original de 1915, Einstein demostró que su teoría, aplicada en una primera aproximación a campos gravitacionales débiles, explicaba correctamente un ligero corrimiento del perihelio de Mercurio que, hasta entonces, había intrigado a los físicos y astrónomos. Asimismo, predecía que la luz, al pasar cerca del Sol, se desviaría un cierto ángulo, lo cual fue confirmado pocos años después observando la posición de estrellas cerca del Sol durante un eclipse solar.

Actualmente se conocen sólo algunas soluciones exactas de las ecuaciones de Einstein, las cuales corresponden a situaciones físicas muy particulares. Por ejemplo, la métrica de Schwarzschild describe el campo gravitacional en el exterior de una distribución de masa con total simetría esférica, y la métrica de Kerr generaliza la de Schwarzschild para incluir el momento angular de la fuente del campo. Siendo exactas estas soluciones, ponen de manifiesto propiedades muy interesantes; en particular, la métrica de Kerr describe el campo gravitacional de un hoyo negro rotante. También se conoce la métrica de Fridman (o Friedmann), descubierta por el físico ruso Alexander Fridman, la cual describe la evolución del Universo en su conjunto, y es de fundamental importancia en cosmología moderna. Problemas más generales, como el choque de hoyos negros y la emisión de ondas gravitacionales, sólo se han podido tratar en años recientes utilizando programas de supercómputo para resolver numéricamente las ecuaciones de Einstein con toda generalidad.

#### PRINCIPIO DE EQUIVALENCIA: CONCLUSIÓN

Es importante señalar que el principio de equivalencia es fundamental para reformular un campo gravitacional en términos de una geometría riemanniana. En efecto, la ecuación de Poisson implica el potencial gravitacio-

nal *por unidad de masa*. En realidad, este potencial es proporcional a la masa gravitacional, por lo que  $\Phi$  debería ser  $(m_g/m_i)\Phi$ , pero  $m_g = m_i$ , y podemos utilizar el mismo potencial  $\Phi$  para todas las partículas de prueba. Lo mismo sucede para las ecuaciones de Einstein: a un campo gravitacional dado se le puede asociar un único espacio riemanniano, independiente de la masa de las partículas de prueba que se mueven en el campo. El mismo razonamiento no se puede aplicar al campo electromagnético y al movimiento de partículas cargadas, ya que el potencial por unidad de masa (inercial) sería proporcional a  $q/m_i$ . Por lo tanto, para reproducir el formalismo anterior, habría que definir un espacio riemanniano distinto para cada partícula de prueba según su razón  $q/m_i$ . Esto ya no tendría sentido, pues se perdería la universalidad del formalismo. Como ya lo mencionamos, el principio de equivalencia es exclusivo de la fuerza gravitacional.

PARA SABER MÁS:

- Hacyan, S., **Relatividad para principiantes**, Fondo de Cultura Económica, 224 pp., Mexico, 1993.

REFERENCIAS

- [1] M. Segre, «Galileo, Viviani and the tower of Pisa», *Studies in History and Philosophy of Science Part A*, vol. 20, n.º 4, págs. 435-451, dic. de 1989.
- [2] S. Hacyan, «Galileo and the equivalence principle: A faulty argument with the correct conclusion», *European Journal of Physics*, vol. 36, n.º 6, pág. 065 044, oct. de 2015.
- [3] L. Bod, E. Fischbach, G. Marx y M. Náráy-Ziegler, «One hundred years of the Eötvös experiment», *Acta Physica Hungarica*, vol. 69, n.º 3, págs. 335-355, abr. de 1991.
- [4] C. M. Will, «The Confrontation between General Relativity and Experiment», *Living Reviews in Relativity*, vol. 17, n.º 1, pág. 4, jun. de 2014.
- [5] V. W. Hughes, H. G. Robinson y V. Beltran-Lopez, «Upper Limit for the Anisotropy of Inertial Mass from Nuclear Resonance Experiments», *Physical Review Letters*, vol. 4, n.º 7, págs. 342-344, abr. de 1960.

- [6] S. Weinberg, «Photons and Gravitons in  $s$ -Matrix Theory: Derivation of Charge Conservation and Equality of Gravitational and Inertial Mass», *Physical Review*, vol. 135, n.º 4B, B1049-B1056, ago. de 1964.
- [7] E. Verlinde, «On the origin of gravity and the laws of Newton», *Journal of High Energy Physics*, vol. 2011, n.º 4, pág. 29, abr. de 2011.
- [8] A. Pais, «Chap. 9 'The happiest thought of my life'», English, en *Subtle Is the Lord: THE Science and the Life of Albert Einstein*, Oxford ; New York: Oxford University Press, nov. de 2005.
- [9] S. Hacyan, *Relatividad Para Estudiantes De Fisica*, Edición: 2. México, D.F.: Fondo de Cultura Económica, oct. de 2013.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

## TRANSFORMACIONES DE NORMA EN DINÁMICAS CLÁSICA, ELECTROMAGNÉTICA Y CUÁNTICA: SUS CONEXIONES

*Eugenio Ley Koo\**

Se reconoce que la idea de transformaciones de norma es compartida por las dinámicas clásica, electromagnética y cuántica, tomando formas específicas y diferentes en cada caso. A pesar de esas diferencias, el Lector puede preguntar si existen conexiones entre las transformaciones de una dinámica a otra. Esta contribución explica la transformación de norma en cada dinámica; cuenta como Fock en 1926 incorporo las interacciones electromagnéticas en la ecuación de onda cuántica, compartiendo una función generadora común de las transformaciones de norma; y cómo Weyl en 1929 dedujo las ecuaciones de la dinámica electromagnética, incluyendo su transformación de norma, a partir de la invariancia bajo transformaciones de norma de la mecánica cuántica. Ambos tipos de conexiones también se tienen entre las dinámicas electromagnética y clásica. También se ha formulado un Principio de Invariancia bajo Transformaciones de Norma.

El propósito de esta contribución es revisar la idea de transformaciones de norma en las dinámicas de Lagrange, Maxwell y Schrödinger, destacando sus similitudes, diferencias y relaciones. Efectivamente esas transformaciones en las dinámicas sucesivas corresponden a: 1) agregarle a la función de Lagrange la derivada total de cualquier función de posición y tiempo, y esta función de Lagrange Transformada conduce a las mismas ecuaciones de movimiento de Euler-Lagrange obtenidas de la función original; 2) agregarle al potencial vectorial electromagnético el gradiente de cualquier función escalar y restarle al potencial escalar electromagnético la derivada temporal parcial de la misma función dividida por la velocidad de la luz, y estos potenciales transformados conducen a los mismos campos

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

de fuerza de inducción magnética y de intensidad eléctrica obtenidos de los potenciales originales; y 3) multiplicar la función de onda en la ecuación de Schrödinger por un factor de fase, exponencial imaginario de cualquier función con unidades de acción dividida por la constante de Planck entre  $2\pi$ , y la función de onda transformada conduce a las mismas densidades de probabilidad y de corriente de probabilidad, así como elementos de matriz de cantidades dinámicas que la función de onda original, adicionalmente en la ecuación de Schrödinger, el operador de cantidad de movimiento aparece modificado con la resta del gradiente de la función de transformación y el término de la energía potencial con la resta de la derivada temporal de la misma función.

Correspondientemente, en las secciones siguientes se explican detalles sobre las transformaciones de norma empezando con la dinámica electromagnética, y continuando con la clásica y la cuántica; se formula el principio de invariancia bajo las transformaciones de norma y se ilustra su aplicación a la dinámica Lagrangiana y a la dinámica cuántica para derivar la dinámica electromagnética.

## TRANSFORMACIONES DE NORMA

### Dinámica Maxwelliana

La idea de transformaciones de norma se reconoció originalmente en el estudio del Electromagnetismo. Por esta razón, aquí empezamos con las ecuaciones de Maxwell como expresiones matemáticas de las leyes que rigen ese tipo de fenómenos, en sus formas de ecuaciones diferenciales y en unidades cgs Gaussianas. (I) Ley de Gauss eléctrica: La divergencia del campo de intensidad eléctrica  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  es igual a  $4\pi$  veces la densidad de carga eléctrica  $\rho(\vec{r}, t)$ . (II) Ley de inducción magnetoeléctrica de Faraday: El rotacional de la intensidad eléctrica es igual al negativo de la derivada parcial con respecto al tiempo de la inducción magnética  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  dividida entre la velocidad de la luz  $c$ . (III) Ley de Gauss magnética: La divergencia del campo de inducción magnética es nula, equivalente a la inexistencia de cargas magnéticas. (IV) Ley de Ampère-Maxwell: El rotacional de la inducción magnética es la suma de  $4\pi/c$  veces la densidad de corriente  $\vec{J}(\vec{r}, t)$  y de la derivada parcial con respecto al tiempo de la intensidad eléctrica dividida entre  $c$ . (V) Ley de conservación de carga eléctrica: Divergencia de la densidad de corriente más derivada parcial con respecto al tiempo de la densidad de carga igualan a cero; ésta es la llamada ecuación de continui-



dad y sigue de calcular la divergencia de (IV) y usar (I). Fuerza de Lorentz: (VI) La fuerza que actúa sobre una partícula con carga  $q$  y velocidad  $\vec{v}$  bajo la acción de un campo eléctrico y un campo magnético es la superposición de la fuerza eléctrica producto de la carga y la intensidad eléctrica  $q\vec{E}$ , y de la fuerza magnética producto de la carga dividida por la velocidad de la luz y el producto vectorial de la velocidad y la inducción magnética  $(q/c)\vec{v} \times \vec{B}$ . Consecuentemente, la intensidad eléctrica es la fuerza por unidad de carga, y la inducción magnética es la fuerza por unidad de carga y por unidad de velocidad normal a  $\vec{B}$ , en cada punto e instante.

Las ecuaciones de Maxwell independientes de las fuentes (III) y (II) hacen posible la introducción de los llamados potenciales electromagnéticos. Efectivamente, el carácter solenoidal de la inducción magnética en (III) indica que la última se puede escribir como (VII) el rotacional de un potencial electromagnético vectorial  $\vec{A}(\vec{r}, t)$ . Entonces, la sustitución de este resultado en la ley de Faraday (II) conduce a reconocer que el rotacional de la suma del campo de intensidad eléctrica y de la derivada parcial con respecto al tiempo del potencial electromagnético vectorial dividida por la velocidad de la luz es nulo; consecuentemente, (VIII) la intensidad eléctrica se puede escribir como la suma del negativo del gradiente de un potencial electromagnético escalar  $\phi(\vec{r}, t)$  y del negativo de la derivada parcial temporal de  $\vec{A}$ .

La interpretación física de los potenciales electromagnético vectorial y escalar sigue inmediatamente al sustituir en la fuerza de Lorentz (VI) las expresiones de los campos de fuerza (VIII) y (VII) en términos de las derivadas respectivas de los potenciales. Efectivamente, la fuerza en (VI) queda expresada como la superposición de un término de gradiente de  $\phi$ , un término de derivada temporal parcial de  $\vec{A}$  y un término con el triple producto vectorial de la velocidad y el rotacional de  $\vec{A}$ . Desde luego, el miembro izquierdo de (VI) se puede escribir como la derivada de la cantidad de movimiento con respecto al tiempo de la partícula cargada, por la segunda ley de movimiento de Newton. Con estos puntos de referencia, procedemos a calcular los dos términos del triple producto vectorial: el primero involucra el gradiente del producto escalar de  $\vec{A}$  y  $\vec{v}$ , y el segundo es negativo e involucra el producto escalar de  $\vec{v}$  y el gradiente de  $\vec{A}$ . El resultado neto del lado derecho incluye el negativo del gradiente de dos términos:  $q\phi - (q/c)\vec{v} \cdot \vec{A}$ , y cuatro términos negativos con derivadas parciales  $\partial/\partial t + \vec{v} \cdot \nabla = d/dt$  equivalentes a la derivada total con signo negativo de  $q\vec{A}/c$ . La comparación de ambos lados de la ecuación nos lleva a la interpre-

tación de que  $q(\phi - \vec{v} \cdot \vec{A}/c) = U_{q, \vec{v}, \vec{A}}^{int}$  es la energía potencial de interacción, y que  $q\vec{A}/c = P_{q, \vec{A}}^{int}$  es la cantidad de movimiento potencial de interacción. En conclusión,  $\phi$  es un potencial de energía por unidad de carga,  $\vec{A}$  es un potencial de energía por unidad de carga y por unidad de velocidad paralela a  $\vec{A}$ , y también es un potencial de cantidad de movimiento por unidad de carga, en cada punto e instante. En los libros de texto la expresión para la contribución de  $\vec{A}$  a la energía potencial de la interacción se le llama la prescripción de acoplamiento mínimo, y su interpretación como cantidad de movimiento no se incluye en la mayoría.

Las transformaciones de norma de los potenciales  $\vec{A}$  y  $\phi$ : (IX)  $\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi$  y  $\phi' = \phi - (1/c)\partial\chi/\partial t$ , ya descritos en la Introducción, al ser sustituidas en (VII), conducen al mismo valor de la inducción magnética al tomar en cuenta que el rotacional de un gradiente es nulo, y en (VIII) conducen al mismo valor de la intensidad eléctrica, al tener en cuenta la cancelación de los términos con el gradiente de la derivada temporal y la derivada temporal del gradiente de  $\chi(\vec{r}, t)$ . Estas transformaciones reconocen que los potenciales no están definidos de manera única. La función  $\chi$  se llama la función generadora de las transformaciones de norma.

#### Invariancia de Lorentz de la Dinámica Electromagnética

Es oportuno revisar también la invariancia de las ecuaciones de Maxwell bajo transformaciones de Lorentz, así como el papel fundamental que jugaron en la formulación de la teoría de la Relatividad Especial por Einstein en 1905, y la subsecuente identificación del espacio-tiempo tetradimensional por Minkowski en 1907, incluyendo las características de cuadvectores, cuadritensores y cuadriescalares de los conceptos y ecuaciones de la dinámica electromagnética.

Efectivamente, Lorentz construyó las transformaciones lineales de coordenadas de posición y de tiempo entre sistemas inerciales bajo la condición de que con ellas las ecuaciones de Maxwell mantengan su forma. Como punto de comparación se tienen las transformaciones de Galileo, en que el tiempo es común a todos los observadores inerciales y las leyes de la dinámica de Newton son invariantes. En las transformaciones de Lorentz la coordenada longitudinal en la dirección del movimiento entre los sistemas inerciales y el tiempo se encuentran combinados en la misma coordenada y el tiempo transformados.

Einstein en su trabajo *Sobre la Electrodinámica de los Cuerpos en Movimien-*

to considera que la hipótesis del éter para la propagación de la luz es superflua, que las leyes del electromagnetismo son válidas en los sistemas inerciales (Principio de Relatividad) y el Principio de constancia de la velocidad de la luz. En base en estos dos principios en la Parte I de Cinemática: analiza la sincronización de relojes en cada sistema inercial, la relatividad de la simultaneidad de un sistema inercial a otro, la contracción de longitudes en la dirección de movimiento de un sistema inercial con respecto a otro, la dilatación del tiempo; y deduce las transformaciones de Lorentz, la ley de adición de velocidades relativista y no lineal, congruente con el segundo principio. En la parte II de Electrodinámica se identifican las propiedades de transformación de las fuentes, y los campos de fuerza entre un sistema inercial y otro, exhibiendo la invariancia de Lorentz de la ecuación de continuidad, y de las ecuaciones de Maxwell, respectivamente.

En 1907 en su ponencia titulada Espacio Tiempo, Minkowski reconoció el carácter tetradimensional del espacio en que ocurren los fenómenos físicos y se mueven los sistemas inerciales. Consecuentemente, las matemáticas apropiadas para su descripción son cuadvectores:  $x_\mu(\vec{r}, t)$  de posición y tiempo con  $\mu = 1, 2, 3, 4$  que se transforman de un sistema inercial a otro  $x_{\mu'} = a_{\mu'\nu} x_\nu$  mediante las transformaciones de Lorentz. También identifica el cuadrado del intervalo espacial temporal y del tiempo propio entre dos eventos:

$$\begin{aligned}(d\sigma)^2 &= -c^2 (d\tau)^2 = (dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2 - c^2 (dt)^2 \\ &= (dx')^2 + (dy')^2 + (dz')^2 - c^2 (dt')^2,\end{aligned}$$

como un invariante de Lorentz, distinguiendo entre eventos separados por intervalos espaciales  $(d\sigma)^2 > 0$ , luminoides  $(d\sigma)^2 = 0$  y temporaloides  $(d\sigma)^2 < 0$  con sus respectivos valores de  $(d\tau)^2$ , así como sus relaciones acausales para los primeros y causales para los otros dos.

El uso de diagramas de espacio-tiempo es muy útil para visualizar, ilustrar y entender los efectos relativistas estudiados por Einstein en la parte Cinemática. Se reconoce la métrica  $(+, +, +, -)$  en el espacio-tiempo de Minkowski con una geometría hiperbólica. Se define el cuadvector de velocidad  $U_\mu = dx_\mu/d\tau = (dt/d\tau)(d\vec{r}/dt, c) = (\gamma_u \vec{u}, c\gamma_u)$ , reconociendo la diferencia entre el tiempo propio  $\tau$  y el tiempo ordinario  $t$ , cuadriescalar el primero y componente temporal de un cuadvector el segundo. La derivada  $dt/d\tau = \gamma_u = 1/\sqrt{1 - u^2/c^2}$  corresponde al factor de dilatación del tiempo, que aparece recurrentemente en las ecuaciones con efectos relativistas. La norma del cuadvector de velocidad  $U_\mu U_\mu = \gamma_u^2 (u^2 - c^2) = -c^2$

es temporaloide por ser negativo, y obviamente invariante y escalar de Lorentz. Las transformaciones entre sus componentes de un sistema inercial a otro  $U_{\mu'} = a_{\mu'\nu}U_{\nu}$  son lineales; se verifica directamente que sus componentes espaciales, longitudinales y transversales, tienen conexiones no lineales que coinciden con las obtenidas por Einstein; sus componentes temporales tienen la conexión  $\gamma_{u'} = \gamma_v \gamma_u (1 - \vec{u} \cdot \vec{v}/c^2)$ .

En la dinámica relativista se define el cuadvivector de cantidad de movimiento y energía  $P_{\mu} = mU_{\mu}$ , siendo la masa  $m$  un cuadvivector invariante de Lorentz. Sus componentes espaciales y temporales son ( $\vec{P} = m\gamma_u \vec{u}$ ,  $E/c = m\gamma_u c$ ) donde se identifica su componente temporal como la energía con la fórmula de equivalencia entre masa y energía asociada a Einstein, con el factor de dilatación del tiempo incluido. La norma de  $P_{\mu}$  es  $\vec{P}^2 - (E/c)^2 = -m^2 c^2$ , también un cuadvivector temporaloide; gráficamente  $mc^2$ ,  $P$  y  $E$  se pueden representar como los catetos y la hipotenusa de un triángulo rectángulo, respectivamente con un ángulo de inclinación  $Pc/E = \text{arc sen}(u/c)$ . En el caso de la luz, con masa nula, el ángulo es de  $90^\circ$  y  $P = E/c$ . La segunda ley de Newton en su forma relativista toma la forma  $dP_{\mu}/d\tau = F_{\mu}$  con componentes de fuerza y potencia  $\vec{F} = \gamma d\vec{P}/dt$ ,  $\mathcal{P} = \gamma dE/cdt$ ; para un sistema aislado con  $F_{\mu} = 0$ , su cantidad de movimiento y su energía se conservan.

En la dinámica Maxwelliana, el cuadvivector de densidad de corriente y carga  $\vec{J}_{\mu} (\vec{J}, c\rho)$  satisface la ecuación de continuidad  $\partial J_{\mu}/\partial x_{\mu} = 0$ ; el cuadvivector de potencial electromagnético  $A_{\mu} (\vec{A}, \phi)$  satisface la condición de norma de Lorentz  $\partial A_{\mu}/\partial x_{\mu} = 0$ ; y los campos de fuerza

$$f_{\mu\nu} = \frac{\partial A_{\nu}}{\partial x_{\mu}} - \frac{\partial A_{\mu}}{\partial x_{\nu}} = -f_{\nu\mu},$$

son las componentes espaciales-espaciales  $\vec{B}$ , y espaciales-temporales  $\vec{E}$  de un cuadvivector antisimétrico. Los potenciales y las fuentes satisfacen la ecuación de onda

$$\frac{\partial}{\partial x_{\mu}} \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} A_{\nu} = -\frac{4\pi}{c} J_{\nu}.$$

Los campos de fuerza satisfacen las ecuaciones de Maxwell que no dependen de las fuentes

$$\frac{\partial f_{\mu\nu}}{\partial x_{\lambda}} + \frac{\partial f_{\nu\lambda}}{\partial x_{\mu}} + \frac{\partial f_{\lambda\mu}}{\partial x_{\nu}} = 0,$$

Ley de Gauss magnética y Ley de Faraday, respectivamente; y las que si

dependen de las fuentes:

$$\frac{\partial f_{\mu\nu}}{\partial x_\mu} = -\frac{4\pi}{c} J_\nu,$$

Ley de Ampère-Maxwell y Ley de Gauss eléctrica, respectivamente.

### Dinámica Lagrangiana

El principio variacional de acción mínima es la base de la formulación de las ecuaciones de movimiento de Euler-Lagrange como alternativa de la formulación Newtoniana de la dinámica clásica. La integral de acción  $S$  se define como la integral de la función de Lagrange  $L(q_s, \dot{q}_s, t)$  multiplicada por la diferencial de tiempo entre una configuración inicial y una configuración final del sistema dinámico, descrito por sus coordenadas  $q_s$  y velocidades  $\dot{q}_s$  generalizadas, donde el punto denota derivación con respecto al tiempo  $t$  y  $s = 1, 2, 3, \dots, D$  distingue los diversos grados de libertad. El conjunto de  $D$  coordenadas y  $D$  velocidades generalizadas constituye un espacio de  $2D$  dimensiones llamado espacio de configuración; cada punto en ese espacio con valores específicos de  $\{q_s\}$  y  $\{\dot{q}_s\}$  corresponde a una configuración específica del sistema dinámico. Entre una configuración inicial  $\{q_s^i, \dot{q}_s^i, t_i\}$  y una final  $\{q_s^f, \dot{q}_s^f, t_f\}$ , las configuraciones  $\{q_s, \dot{q}_s, t\}$  en cada instante  $t$  en el intervalo  $[t = t_i, t = t_f]$  determinan el movimiento del punto que describe el cambio en las configuraciones en el espacio de configuración. En el caso de fuerzas conservativas, la función Lagrangiana es la diferencia de la energía cinética  $K(\{q_s, \dot{q}_s\})$  menos la energía potencial  $U(\{q_s\})$ .

La integral de acción toma valores que dependen de la trayectoria que el sistema siga en el espacio de configuración entre la configuración inicial y la configuración final. El principio variacional considera que la trayectoria que el sistema dinámico sigue corresponde a la que tiene la integral de la acción mínima, y en el proceso de implementar esta condición se deducen las ecuaciones de movimiento de Euler-Lagrange para cada grado de libertad:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_s} = 0. \quad (7.1)$$

La derivada parcial de la función de Lagrange con respecto a la velocidad generalizada corresponde a la cantidad de movimiento canónicamente conjugada a la coordenada de posición, y su derivada parcial con respecto a la coordenada misma corresponde al negativo de la componente respectiva

del gradiente de la energía potencial, que es la fuerza. En este sentido, la ecuación (7.1) es una extensión o generalización, alternativa a la segunda Ley de Newton.

La transformación de norma en este caso corresponde a agregar a la función Lagrangiana original una derivada total con respecto al tiempo de una función de las coordenadas generalizadas y del tiempo:  $L \rightarrow L' = L + \frac{d\chi}{dt}$ , también descrita en la Introducción. La contribución a la variación en la integral de acción de esa derivada es  $\delta\chi|_i^f$ ; y su valor es nulo porque en ambos límites inicial y final la función generadora  $\chi$  tiene los mismos valores respectivos independiente de las trayectorias.

Consecuentemente, las ecuaciones de Euler-Lagrange (7.1) son las mismas para  $L$  y para  $L'$ . Se dice que los Lagrangianos son equivalentes. La función  $\chi$  tiene dimensiones de acción, energía multiplicada por tiempo o cantidad de movimiento multiplicada por distancia.

#### Dinámica Cuántica de Schrödinger

La ecuación de onda cuántica dependiente del tiempo de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[ \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t), \quad (7.2)$$

contiene en su lado izquierdo el operador de evolución en el tiempo en su forma diferencial y en su lado derecho al operador Hamiltoniano  $\hat{H}(p, \vec{r})$  con sus términos de energía cinética  $p^2/2m$  y de energía potencial  $U(\vec{r})$ , donde el operador de cantidad de movimiento  $\vec{p} = -i\hbar\nabla$  es proporcional al gradiente;  $i = \sqrt{-1}$  es la unidad imaginaria,  $h$  es la constante de Planck, unidad natural de acción, y  $\hbar = h/2\pi$ .

La función de onda  $\Psi(\vec{r}, t)$  es una amplitud de probabilidad en el sentido de que  $\Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t)$  es una densidad de probabilidad, cuya integral volumétrica es igual a uno a todos los tiempos. También se identifica una densidad de corriente de probabilidad  $J(\vec{r}, t) = \frac{1}{2i\hbar m} [\Psi^*\nabla\Psi - (\nabla\Psi^*)\Psi]$ , tal que  $\nabla \cdot \vec{J} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0$  y la probabilidad se conserva.

Si se tienen diferentes soluciones de la ecuación  $\Psi_i(\vec{r}, t)$ ,  $\Psi_j(\vec{r}, t)$  correspondientes a diferentes estados cuánticos del sistema físico, y una cantidad dinámica representada por un operador  $\hat{O}$ , los elementos de matriz del último entre las primeras son

$$\langle \Psi_j | \hat{O} | \Psi_i \rangle = \int d^3r' \Psi_j^* \hat{O} \Psi_i, \quad (7.3)$$

y representan las amplitudes de transición de un estado cuántico al otro mediada por la cantidad dinámica.

En general, las soluciones de la ecuación (7.2) son funciones complejas, y sus fases no están definidas de manera única. Estas características se toman en cuenta en las transformaciones de norma en la dinámica cuántica, que consiste en multiplicar cada función de onda por un factor de fase común:

$$\Psi'(\vec{r}, t) = e^{i\chi(\vec{r}, t)/\hbar} \Psi(\vec{r}, t), \quad (7.4)$$

en cada punto e instante. Se puede corroborar que la densidad de probabilidad, la densidad de corriente de probabilidad y los elementos de matriz para  $\Psi$  y para  $\Psi'$  permanecen iguales.

Aquí también se puede averiguar cuál es la ecuación que satisface la función transformada  $\Psi'$ , usando la transformación inversa

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-i\chi(\vec{r}, t)/\hbar} \Psi'(\vec{r}, t), \quad (7.5)$$

y sustituyendo en la ecuación (7.2). La derivada parcial del lado izquierdo contiene dos términos: el primero es la exponencial por la derivada parcial de  $\Psi'$ , y el segundo  $i(-i)$  veces la derivada parcial de  $\chi$  multiplicada por dos factores. Del lado derecho la aplicación del operador  $\hat{p}$  también contiene dos términos: el primero es la exponencial por  $\hat{p}\Psi'$ , y el segundo  $(-i)(-i)$  el gradiente de  $\chi$  por los dos factores; la segunda aplicación del operador  $\hat{p}$  a esos dos términos contiene cinco términos con la exponencial común factorizada:  $p^2\Psi'$ ,  $-2(\nabla\chi)(\hat{p}\Psi')$ ,  $(-i)^2(\nabla\chi)^2\Psi'$  y  $(\hat{p} \cdot \nabla\chi)\Psi'$ .

El resultado neto es la ecuación para  $\Psi'$ :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m} (\hat{p} - \nabla\chi)^2 \Psi' + \left( U - \frac{\partial \chi}{\partial t} \right) \Psi', \quad (7.6)$$

donde los cinco términos del párrafo anterior están contenidos en el término con el cuadrado del operador binomial diferencia entre el operador de cantidad de movimiento y el gradiente de  $\chi$ ; adicionalmente a la energía potencial se le sustrae la derivada parcial con respecto al tiempo de  $\chi$ ; La comparación de las ecuaciones (7.2) y (7.6) muestra que  $\Psi'$  no satisface la misma ecuación satisfecha por  $\Psi$ .

En lo que sigue se describe primero cómo Fock en 1926 modificó la ecuación (7.6) para incorporar la interacción electromagnética en ella y en (7.2), y formular invariancia bajo transformaciones de norma del tipo (7.4) y (7.5). También se ilustra la derivación de Weyl de las ecuaciones de Maxwell en 1929, a partir de tal invariancia. Adicionalmente, se recomienda la lectura de las versiones didácticas de Kobe para esa derivación a partir de la invariancia de las ecuaciones cuánticas 1978 y clásicas 1980.

Invariancia bajo transformaciones de norma de las ecuaciones de la dinámica cuántica con la dinámica electromagnética incorporada

Fock reconoció que las diferencias entre las ecuaciones (7.2) y (7.6) se pueden eliminar si en ambas se incorporan el potencial vectorial electromagnético de cantidad de movimiento por unidad de carga y el potencial escalar electromagnético de energía por unidad de carga en los términos respectivos del Hamiltoniano. En el proceso también se identifican las conexiones entre las funciones generadoras de las transformaciones de norma de los potenciales y de fase de la amplitud de probabilidad.

Procedemos a escribir primero la ecuación (7.2) con los potenciales electromagnéticos incorporados:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[ \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{q\vec{A}}{c} \right)^2 + (U + q\phi) \right] \Psi, \quad (7.7)$$

y la ecuación (7.6) para la función de onda transformada:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \left[ \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{q\vec{A}}{c} - \nabla \chi_f \right)^2 + \left( U + q\phi - \frac{\partial \chi_f}{\partial t} \right) \right] \Psi'. \quad (7.8)$$

Desde luego la diferencia entre (7.7) y (7.8) es la misma que entre (7.2) y (7.6) por el cambio de fase. Lo importante, es que  $\vec{A}$  y  $\phi$  tienen todavía sus propias transformaciones de norma  $\vec{A}' = \vec{A} + \nabla \chi_{em}$ ,  $\phi' = \phi - \frac{\partial \chi_{em}}{c \partial t}$ . Agregamos los índices  $f$  y  $em$  a las respectivas funciones generadoras de las transformaciones de norma, para distinguirlas y también relacionarlas. Efectivamente, si  $\vec{A}$  y  $\phi$  en (7.8) se escriben en términos de  $\vec{A}'$  y  $\phi'$  y tomamos  $(q/c) \chi_{em} = \chi_f$  entonces sus gradientes y derivadas parciales con respecto al tiempo se cancelan en los términos respectivos:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \left[ \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{q\vec{A}'}{c} \right)^2 + (U + q\phi') \right] \Psi' \quad (7.9)$$

y esta ecuación tiene la misma forma que (7.7). La ecuación de Schrödinger con la interacción electromagnética incorporada es invariante bajo las transformaciones de norma de los potenciales electromagnéticos y de fase  $\chi_f/\hbar = q\chi_{em}/c\hbar$  de las amplitudes de probabilidad en (7.4), con la función generadora común  $\chi_{em}$ .



Deducciones de la dinámica electromagnética a partir de la invariancia de norma de las dinámicas cuántica y clásica

A continuación se describe el análisis de Weyl para deducir las ecuaciones de Maxwell del electromagnetismo a partir de la invariancia de la ecuación de Schrödinger en sus formas de las ecuaciones (7.8) y (7.9) bajo las transformaciones de norma de los potenciales (IX) y de la ecuación (7.4). Se asocia a la partícula la propiedad de carga eléctrica como una cantidad escalar. De (7.8) se sigue la interpretación de  $\vec{A}$  y  $\phi$  como potenciales de cantidad de movimiento y de energía por unidad de carga, respectivamente. Se reconoce que la libertad de las transformaciones de norma de los potenciales electromagnéticos hace que éstos no sean las cantidades físicas directamente medibles. En cambio, sus derivadas vectoriales y temporales en las combinaciones:

$$\nabla \times \vec{A} = \vec{B} \quad (\text{X}), \quad -\nabla\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \vec{E} \quad (\text{XI}),$$

son invariantes bajo las transformaciones de norma. La cantidad vectorial  $\vec{E}$  se interpreta como una fuerza eléctrica por unidad de carga en cada punto e instante y se llama intensidad eléctrica. La cantidad vectorial  $\vec{B}$  resulta ser solenoidal:  $\nabla \cdot \vec{B} = 0$  y esta Ley de Gauss (III) indica que no tiene cargas como sus fuentes. La relación (XI) establece la relación entre el rotacional de  $\vec{E}$  y la derivada parcial con respecto al tiempo de  $\vec{B}$ :  $\nabla \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$  que es la ley de Faraday de inducción magneto-eléctrica (II);  $\vec{B}$  misma se llama inducción magnética. Estas dos leyes que no dependen de las fuentes siguen de las conexiones entre potenciales electromagnéticos y campos de fuerza (X) y (XI).

A continuación seguimos a Kobe (1978) para establecer la conservación de carga identificando las densidades de carga y de corriente a partir de (7.7), así como establecer la conservación de energía para la partícula y el campo, identificando sus respectivas densidades de energía y de corriente de energía, con sus correspondientes fuentes y sumideros.

Es relevante señalar que en (7.7),  $\vec{p}$  es la cantidad de movimiento total; al sustraerle la cantidad de movimiento de interacción entre su carga y el potencial electromagnético vectorial, el binomio corresponde a la cantidad de movimiento de la partícula misma. Entonces se identifica su operador de velocidad:

$$\hat{v} = (\hat{p} - q\vec{A}/c) / m. \quad (7.10)$$

Primero se identifica la densidad volumétrica de carga

$$\rho_c = \Psi^* q \Psi, \quad (7.11)$$

cuya integral de volumen da la carga misma  $q$ . La derivada parcial con respecto al tiempo de  $\rho_c$  se puede calcular a partir de las ecuaciones de Schrödinger para  $\Psi$  y  $\Psi^*$ . Los términos asociados a la energía potencial se cancelan, y los términos cuadráticos en  $\vec{v}$ , (7.10), se pueden escribir como el negativo de la divergencia de la densidad de corriente eléctrica,

$$\vec{J}_c = q \operatorname{Re}\{\Psi^* \vec{v} \Psi\}. \quad (7.12)$$

En conclusión se llega a la ecuación de continuidad,

$$\nabla \cdot \vec{J}_c + \frac{\partial \rho_c}{\partial t} = 0, \quad (7.13)$$

que describe la conservación de carga eléctrica. Ambas densidades de carga y de corriente (7.11) y (7.12) son invariantes bajo las transformaciones de norma (7.4) y (IX), y por lo tanto son medibles y observables.

Kobe propone la identificación de la densidad de energía de la partícula a partir del Hamiltoniano de (7.7) con  $\phi = 0$ ,  $\hat{H}(\vec{A}, 0)$ :

$$U_p = \operatorname{Re}\left\{\Psi^* \hat{H}(\vec{A}, 0) \Psi\right\}. \quad (7.14)$$

En forma similar a la del párrafo anterior, el cálculo de la derivada parcial con respecto al tiempo de esta densidad lleva a la ecuación de continuidad inhomogénea:

$$\frac{\partial U_p}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{S}_p = f_p, \quad (7.15)$$

donde se identifican la densidad de corriente de energía:

$$\vec{S}_p = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\left\{\Psi^* \left\{\hat{v}, \hat{H}(\vec{A}, 0) \Psi\right\}\right\} - \frac{\hbar^2}{4mq} \nabla \frac{\partial \rho}{\partial t}, \quad (7.16)$$

en que el corchete corresponde al anticonmutador  $\{a, b\} = ab - ba$ ; y el término de fuente:

$$f_p = \vec{E} \cdot \vec{J}_c. \quad (7.17)$$

El primer término de (7.16) es la densidad del operador del flujo de energía, y el segundo que es específicamente mecánico cuántico se anula

en el límite en que  $\hbar \rightarrow 0$ . El término de fuente mide la energía intercambiada por unidad de volumen y por unidad de tiempo entre el campo y la partícula cargada, en cada punto e instante.

Para el campo electromagnético se espera que también tenga una densidad de energía  $U_{em}$ , una densidad de flujo de energía  $\vec{S}_{em}$ , y una fuente o sumidero  $f_{em}$ , que satisfagan la ecuación de continuidad inhomogénea correspondiente:

$$\frac{\partial U_{em}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{S}_{em} = f_{em}. \quad (7.18)$$

Las densidades de energía y de flujo de energía se deben construir a partir de los campos vectorial  $\vec{E}$  y pseudovectorial  $\vec{B}$ , cantidades observables independientes de las transformaciones de norma. Las cantidades  $U_{em}$  y  $f_{em}$  deben ser escalares, y  $\vec{S}_{em}$  debe ser un vector. En la teoría más simple se incorporan expresiones cuadráticas en  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$ :

$$U_{em} = \alpha \vec{E} \cdot \vec{E} + \beta \vec{B} \cdot \vec{B}, \quad (7.19)$$

$$\vec{S}_{em} = \gamma \vec{E} \times \vec{B}, \quad (7.20)$$

$$f_{em} = \delta \vec{E} \cdot \vec{J}_c, \quad (7.21)$$

con coeficientes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  y  $\delta$  por ser determinados. Koba incluye los productos pseudoescalares  $\vec{E} \cdot \vec{B}$  en  $U_c$  y  $\vec{B} \cdot \vec{J}$  en  $f_c$ , encontrando que sus coeficientes deben anularse.

La sustitución de (7.19–7.21) en (7.18) conduce a restricciones sobre las derivadas rotacionales y parciales con respecto al tiempo de los campos de fuerza, la densidad de corriente y los coeficientes respectivos:

$$\vec{E} \cdot \left[ 2\alpha \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \gamma (\nabla \times \vec{B}) - \delta \vec{J} \right] + \vec{B} \cdot \left[ 2\beta \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \gamma (\nabla \times \vec{E}) \right] = 0. \quad (7.22)$$

De manera natural, en el primer término aparecen las derivadas de los campos y la fuente de la ley de Ampère-Maxwell, y en el segundo término los de la ley de Faraday. La última ya deducida anteriormente (II) requiere que la razón entre los coeficientes sea  $2\beta/\gamma = c$ , y en el camino anula el segundo término. Consideramos a continuación la divergencia del vector dentro del paréntesis en el primer término

$$2\alpha \frac{\partial}{\partial t} \left[ \nabla \cdot \vec{E} - \delta \nabla \cdot \vec{J} \right] = \frac{\partial}{\partial t} \left[ 2\alpha \nabla \cdot \vec{E} + \delta \rho \right], \quad (7.23)$$

en que ya usamos la ecuación de continuidad para la carga eléctrica (V). Ahora reconocemos los elementos de la ley de Gauss eléctrica (I) a la que

podemos llegar con la restricción  $\delta/2\alpha = -4\pi$ , con la cancelación del paréntesis correspondiente. Regresando al primer término en (7.22) la anulación del vector dentro del paréntesis y en consistencia con la ley de Ampère-Maxwell (IV) impone las restricciones  $2\alpha/\gamma = c$  y  $\delta/\gamma = -\frac{4\pi}{c}$ .

Las relaciones entre los coeficientes permiten la determinación de todos y cada uno de ellos:  $\alpha = \beta = 1/8\pi$ ,  $\gamma = c/4\pi$  y  $\delta = -1$ . En conclusión, además de haber deducido las ecuaciones de Maxwell, las expresiones para: las densidades de energía, del vector de Poynting y de la energía intercambiada entre la partícula cargada y el campo de intensidad eléctrica son explícitamente:

$$U_{em} = (\vec{E} \cdot \vec{E} + \vec{B} \cdot \vec{B})/8\pi, \quad \vec{S}_{em} = c\vec{E} \times \vec{B}/4\pi, \quad f_{em} = -\vec{E} \cdot \vec{J}_c, \quad (7.24)$$

y están relacionadas por el teorema de Poynting (7.18).

La conservación de energía para el sistema de partícula cargada y campo electromagnético se refleja en los términos de fuente/sumidero en (7.15) y (7.18) con la misma magnitud y signos opuestos.

También es muy interesante e instructivo, seguir a Kobe (1980) en su *Derivación de las Ecuaciones de Maxwell a partir de la Invariancia de Norma de la Mecánica Clásica*. Su tratamiento parte de la Lagrangiana de una sola partícula  $L_0(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2 - U(\vec{r})$  y su acción  $S_0$  la cual al ser minimizada conduce a la ecuación de movimiento de Euler-Lagrange equivalente a la segunda ley de movimiento de Newton. A continuación le agrega a  $L_0$  la derivada con respecto al tiempo de la función  $(q/c)\chi(t)$ , con parámetros por ser determinados  $q$  y  $c$ , obteniendo la Lagrangiana con su transformación de norma  $L_0 + (q/c)\frac{d\chi}{dt}$ . La acción transformada y la acción original están relacionadas por  $S'_0 = S_0 + (q/c)[\chi(\vec{r}_f, t_f) - \chi(\vec{r}_i, t_i)]$ .

La minimización de  $S'_0$  es equivalente a la minimización de  $S_0$  porque la variación de la función generadora es nula en las configuraciones inicial y final. Las ecuaciones de movimiento obtenidas a partir de  $S'_0$  y  $S_0$  son las mismas y los Lagrangianos  $L'_0$  y  $L_0$  son equivalentes.

Supongamos que la partícula con masa  $m$  tiene una propiedad adicional  $q$  que llamamos *carga*. Para una carga puntual le asociamos una distribución volumétrica  $\rho(\vec{x}, t) = q\delta(\vec{x} - \vec{r}(t))$ , cuya integral de volumen es la carga  $q$ . También tiene asociada una densidad de corriente  $\vec{J}(\vec{x}, t) = q\dot{\vec{r}}\delta[\vec{x} - \vec{r}(t)]$ . De esta manera la Lagrangiana transformada se puede escribir en términos de integrales de estas densidades de carga y de corrientes, en dos pasos:

$$\frac{d\chi}{dt} = \frac{\partial\chi}{\partial t} + \dot{\vec{r}} \cdot \nabla\chi, \quad (7.25)$$

y al sustituir:

$$\begin{aligned} L'_0 &= L_0 + \frac{1}{c} \int d^3x \left[ c\rho(\vec{x}, t) \frac{\partial\chi(\vec{x}, t)}{c\partial t} + \vec{J}(\vec{x}, t) \cdot \nabla\chi(\vec{x}, t) \right] \\ &= L_0 - \frac{1}{c} \int d^3x \left[ \frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} \right] \chi + \frac{d}{dt} \left[ \frac{1}{c} \int d^3x \rho\chi \right]. \end{aligned} \quad (7.26)$$

El paso del primer renglón al segundo involucra la integración por partes, y la suposición de que la densidad de corriente se anule al infinito. El último término se puede integrar y se reduce a la derivada total de la función generadora que hace la diferencia entre  $L'_0$  y  $L_0$  desde el párrafo anterior, siempre y cuando la integral del segundo término se anule, lo que se logra si se satisface la ecuación de continuidad:

$$\nabla \cdot \vec{J} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0 \quad (\text{V}).$$

Ésta nos lleva a reconocer que la *carga* se conserva.

Por otra parte, la forma de la integral en el primer renglón sugiere que la densidad de carga y de corriente pueden interactuar dinámicamente a través de un nuevo tipo de fuerzas. La invariancia de norma de la Lagrangiana sirve de base para investigar esta posibilidad. No se trata de la invariancia de la Lagrangiana  $L_0$  original, sino de una nueva Lagrangiana  $L_{0,i}$  en que se incorpore la nueva interacción. La primera forma de  $L'_0$  sugiere la introducción de un potencial escalar  $\phi$  y de un potencial vectorial  $\vec{A}$  para definir:

$$L_{0,i} = L_0 + \frac{1}{c} \int d^3x \left( \vec{J} \cdot \vec{A} - \rho c\phi \right), \quad (7.27)$$

en que la integral del segundo término es el Lagrangiano de interacción  $L_i$  entre la partícula cargada a través de la densidad de corriente y de carga con los respectivos potenciales. Entonces se realiza la transformación de norma de la Lagrangiana completa

$$L'_{0,i} = L_{0,i} + \frac{q}{c} \frac{d\chi}{dt}, \quad (7.28)$$

$$= L_0 + \frac{1}{c} \int d^3x \left[ \vec{J} \cdot \left( \vec{A} + \nabla\chi \right) - c\rho \left( \phi - \frac{\partial\chi}{c\partial t} \right) \right], \quad (7.29)$$

$$= L_0 + \frac{1}{c} \int d^3x \left[ \vec{J} \cdot \vec{A}' - c\rho\phi' \right], \quad (7.30)$$

en que se reconocen la superposición de los términos provenientes de  $L_{0,i}$  y  $L'_{0,i}$ , y las transformaciones de norma de los potenciales

$$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\chi, \quad \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t}, \quad (7.31)$$

con una función generadora común. Sobre todo se debe notar la invariancia de norma de las Lagrangianas  $L_{0,i}$  y  $L'_{0,i}$  con los potenciales originales y transformados, respectivamente.

La acción para la Lagrangiana con interacción electromagnética

$$S_{0,i} = \int L_{0,i} dt, \quad (7.32)$$

al ser minimizada lleva a las ecuaciones de movimiento completas

$$m\ddot{\vec{r}} = -\nabla U + q \left( -\nabla\phi - \frac{\partial\vec{A}}{c\partial t} \right) + \frac{q}{c} \dot{\vec{r}} \times (\nabla \times \vec{A}). \quad (7.33)$$

Aquí se identifican la fuerza mecánica original y la fuerza de Lorentz (VI) con sus componentes eléctrica  $q\vec{E}$  y magnética  $(q/c)\dot{\vec{v}} \times \vec{B}$ , en términos del campo de intensidad eléctrica  $\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$  (XI), y del campo de inducción magnética  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$  (X), los cuales son invariantes bajo las transformaciones de norma de los potenciales.

La derivación de las ecuaciones de Maxwell independientes de las fuentes sigue de las relaciones entre los campos de fuerza y los potenciales electromagnéticos, como en el caso a partir de la mecánica cuántica. Las ecuaciones dependientes de las fuentes se obtienen al considerar la Lagrangiana completa.

$$L = L_{em} + L_0 + L_i, \quad (7.34)$$

con la propuesta de que la Lagrangiana del campo electromagnético sea escalar y cuadrática en los campos de fuerza

$$L_{em} = \int d^3x \left( \alpha \vec{E} \cdot \vec{E} + \beta \vec{B} \cdot \vec{B} \right). \quad (7.35)$$

Los campos de fuerza son funciones de los potenciales en las formas de sus derivadas respectivas y  $L_i$  es lineal en los mismos potenciales  $\vec{A}$  y  $\phi$ . Estos se toman como coordenadas generalizadas, y sus derivadas totales con respecto al tiempo como velocidades generalizadas.

La acción total  $S$  es la integral en el tiempo de la Lagrangiana total. Su variación minimizada conduce a las ecuaciones de Euler-Lagrange para los campos de fuerza, o sea las ecuaciones de Maxwell. Efectivamente la variación y minimización con respecto a  $\phi$  conduce a:

$$2\alpha \nabla \cdot \vec{E} - \rho = 0, \quad (7.36)$$

que es la ley de Gauss eléctrica (I) con la identificación  $\alpha = 1/8\pi$  en unidades Gaussianas. Por otra parte, la variación con respecto a  $\vec{A}$  conduce a:

$$\frac{2\alpha}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{1}{c} \vec{J} + 2\beta \nabla \times \vec{B} = 0 \quad (7.37)$$

que es la ley de Ampère-Maxwell con la identificación de  $\beta = -1/8\pi$ . Además de la deducción de las ecuaciones de Maxwell dependientes de las fuentes se identifica la densidad Lagrangiana del campo electromagnético  $\mathcal{L}_{em} = (\vec{E} \cdot \vec{E} - \vec{B} \cdot \vec{B})/8\pi$ , invariante bajo transformaciones de norma y también invariante bajo transformaciones de Lorentz.

También es útil comparar las diferencias en las metodologías de los dos artículos de Kobe y sus resultados, determinadas por las dinámicas cuántica y clásica respectivas como puntos de partida. En la primera se usa la conservación de energía de la partícula y del campo para realizar la deducción; en la segunda se construye la Lagrangiana total y se escriben las ecuaciones de Euler-Lagrange, para el campo y para la partícula incluyendo la fuerza de Lorentz. En la comparación de las densidades de energía  $U_{em}$  y la densidad Lagrangiana que comparten los mismos términos con la diferencia de signo; ambas comparten la invariancia bajo transformaciones de norma, pero mientras la segunda es invariante de Lorentz como ya se señaló en el párrafo anterior,  $U_{em}$  es la componente temporal-temporal del tensor de esfuerzos de Maxwell.

Inicialmente se analizaron las transformaciones de norma para las tres dinámicas separadamente, cada una con su propia función generadora. En esta sección se han establecido las relaciones entre las funciones respectivas de la dinámica electromagnética y las otras dos.

El principio de invariancia de norma también ha jugado un papel central en el desarrollo de las teorías cuánticas de campo, como se discute en otros capítulos de este Libro.

PARA SABER MÁS:

- Fock, V., *Über die invariante Form der Wellen- und der Bewegungsgleichungen für einen geladenen Massenpunkt*. Z. Physics, **39** (226), 1926.
- Weyl, H., *Elektron und Gravitation. I*. Z. Physics, **56** (330), 1929.
- Kobe, D., *Derivation of Maxwell's equations from the local gauge invariance of quantum mechanics*. American Journal of Physics, **46** (342), 1978.
- Kobe, D., *Derivation of Maxwell's equations from the local gauge invariance of classical mechanics*. American Journal of Physics, **48** (348), 1980.



## II

### ONDAS POR TODOS LADOS



## RESONANCIAS A DIFERENTES ESCALAS

*Mayo Villagran Muniz\**

Todos los sistemas oscilatorios se caracterizan por tener una o varias frecuencias naturales de vibración. Cuando éstos son sometidos a un estímulo externo, también de carácter oscilatorio y con una frecuencia propia, la amplitud de las oscilaciones crece dramáticamente a medida que ambas frecuencias se acercan entre sí. Este fenómeno, conocido como resonancia, se encuentra en el corazón de muchos efectos que ocurren en sistemas físicos a todo nivel. Por ejemplo, la resonancia puede explicar la ruptura de algunos sistemas mecánicos (como un puente) o la amplificación de ondas sísmicas por terrenos fangosos, pero también, de modo mucho menos evidente, permite entender el origen del color de algunos objetos materiales o la forma en que éstos absorben la luz. De forma a veces sorprendente, las analogías nos llevan a comprender fenómenos que en apariencia son completamente inconexos, pero que en realidad tienen el mismo origen físico fundamental. Al establecer conexiones en contextos diferentes, es mucho el conocimiento nuevo que se puede extraer de conceptos “viejos”, como es el caso de las resonancias.

Uno de los fenómenos que encontramos sistemáticamente en la naturaleza son las resonancias, y como la física estudia la naturaleza, se ha encargado de entenderlas, explicarlas y aplicarlas. Cuando pensamos en resonancias, quizás la primera imagen que se nos aparece es la de la cantante de ópera que rompe el vaso. Los físicos sabemos por qué ocurre esto, lo explicamos con fórmulas y podemos predecir estos eventos. Los militares por ejemplo, saben que no deben marchar cuando cruzan por un puente colgante. Seguramente, poca gente que no sea especialista sabe por qué. Desde la ciencia sabemos que, si de casualidad la frecuencia con que golpean el piso

---

\*Departamento de Fotofísica y Películas Delgadas, Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Universidad Nacional Autónoma de México

(aproximadamente de 1 Hz) coincide con la frecuencia natural del puente, éste puede entrar en resonancia y derrumbarse.

Las resonancias del vaso y los puentes son mecánicas, en este capítulo veremos que hay resonancias por todos lados y todas pueden ser explicadas igual. Como este fenómeno es un hilo conductor en la carrera del físico, plantaremos primero algunas fórmulas sencillas y veremos que las podemos aplicar en todas las resonancias: mecánicas, eléctricas, químicas, cuánticas o en el campo que se les ocurra.

El oscilador armónico y el átomo de hidrógeno los entendemos muy bien, y mediante algunas simplificaciones, con ellos tratamos de explicar todo. Para el estudio de la resonancia, los libros de texto usualmente comienzan con el oscilador simple, como un resorte o un péndulo. Luego lo complican añadiendo una fuerza periódica, y por último, introducen un amortiguamiento en la forma de un oscilador amortiguado forzado. Con él se pueden explicar todas las resonancias. Pero el punto es que en nuestra vida cotidiana difícilmente veremos un péndulo o un resorte amortiguado forzado, y el fenómeno va mucho más allá, tiene cuantiosas aplicaciones y además, como veremos, no solo se limita a la mecánica: el mismo fenómeno aparece en electromagnetismo, electrónica y en mecánica cuántica.

El movimiento de una masa  $m$  unida a un resorte de constante de restitución  $K$  es gobernado por una ecuación diferencial que describe el movimiento armónico simple. En el estado estacionario la masa se moverá con una sola frecuencia

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{K}{m}}. \quad (8.1)$$

Esta es la frecuencia natural del sistema, con la que se moverá si se lo deja oscilar libremente. Si agregamos ahora una fuerza periódica sobre la masa

$$F = F_0 \cos(\omega t), \quad (8.2)$$

tenemos el oscilador armónico forzado. Aplicando la segunda ley de Newton, se puede llegar a una ecuación diferencial que gobierna la posición de la masa en función del tiempo, cuya solución para la amplitud del movimiento es

$$A = \frac{F_0}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}. \quad (8.3)$$

De aquí vemos que si la frecuencia externa se acerca a la frecuencia natural, la amplitud del sistema tiende a infinito y se dice que entra en resonancia. En estado estacionario, un sistema oscilante responde a la frecuencia de forzamiento, no a su frecuencia natural. La respuesta se puede referir a

la amplitud, velocidad de vibración o a la fase; todas nos enseñan cosas interesantes del fenómeno, pero nos centraremos en la amplitud de respuesta. Para ser más realistas, deberíamos de considerar el estado transitorio: no todo ocurre de inmediato y a los sistemas reales les lleva varios ciclos llegar a lograr la máxima amplitud, por lo que la excitación debe de ser duradera. También deberíamos de considerar el amortiguamiento que nos diría que para que el sistema resuene, la frecuencia de la fuerza externa no es exactamente la frecuencia natural, pero en la mayoría de los casos, esta diferencia no es apreciable.

Por lo tanto, si tenemos un sistema elástico y lo excitamos con una fuerza cuya frecuencia coincide con la frecuencia natural, tendremos resonancia. Veremos a continuación varios ejemplos de estas fuerzas oscilantes que hacen resonar sistemas, no solo para romperlos, sino también para aplicar este fenómeno y lo veremos en distintos tipos de resonancias en nuestra vida cotidiana, en la ciencia y en la tecnología. En toda esta exposición del fenómeno de resonancia trataremos el régimen lineal, donde pequeñas oscilaciones pueden producir grandes efectos. Cuando las fuerzas impulsoras son muy intensas, entramos en el régimen no lineal, con situaciones complicadas que escapan a este capítulo.

## EJEMPLOS

Los sistemas mecánicos como el vaso o el puente que se rompe, son los más directos y conocidos, pero también podemos explicar la amplificación de ondas en instrumentos como el piano o la guitarra. Una cuerda tensa tiene infinitas frecuencias naturales, múltiplos de una frecuencia natural (armónicos) y es por eso que resuena frente a cualquier perturbación. Las resonancias del suelo en los sismos, por ejemplo en la Ciudad de México, son las que más nos deben de preocupar y el trabajo de Jorge Flores y colaboradores es una excelente explicación de las resonancias en la CDMX que todos deberíamos de leer.

Para que ocurran resonancias deben existir fuerzas oscilantes y éstas están por todos lados, tales como los sonidos ambientales, las vibraciones del motor de un auto, que puede resonar con sus partes o con sus ocupantes y producir efectos no deseados. También nos rodean sistemas elásticos con sus propias frecuencias, por lo que es lógico que tengamos muchas resonancias alrededor. Nuestro cuerpo o nuestros huesos generalmente resuenan a unas decenas de hertz (Hz, ciclos por segundo), las ventanas de un cuarto cuando escuchamos música pueden llegar a vibrar, sobre todo para sonidos

graves o bajas frecuencias que pueden coincidir con las naturales de los vidrios. Como la copa que se rompe porque el sonido del cantante produce una onda estacionaria de la frecuencia natural, que podemos excitar también nosotros, frotando la copa con el dedo y producir sonidos agradables. Una resonancia simpática es la de los mosquitos hembras que aletean a la frecuencia de resonancia de las antenas de los machos para atraerlos.

Pero las resonancias no son solo mecánicas, la más abundantes son las resonancias ópticas y gracias a ellas vemos el mundo que nos rodea. Estamos hablando de resonancias de la luz, esas ondas electromagnéticas con longitudes de onda entre 390 y 750 nm, que actúa como fuerza impulsora e interacciona con la materia, que tiene sus propias frecuencias naturales. Consideremos los electrones y el núcleo de un átomo como un sistema con sus frecuencias naturales. Cuando sobre algún medio, que imaginamos como un conjunto de osciladores, incide luz, cada átomo oscilará controlado por el campo eléctrico que varía periódicamente. Por lo tanto, la fuerza sobre los electrones y el núcleo también será periódica y el desplazamiento relativo entre la nube y el núcleo será:

$$x(t) = \frac{\frac{q_e}{m_e}}{(\omega_0^2 - \omega^2)} E(t). \quad (8.4)$$

Igual que en el resorte, si no aplicamos una fuerza externa, en este caso la luz, el sistema oscilará con sus frecuencias naturales  $\omega_0$ . Cuando la frecuencia de la luz incidente es menor que  $\omega_0$ , el desplazamiento sigue a la fuerza y decimos que están en fase. Si la frecuencia es tal que  $\omega > \omega_0$ , el desplazamiento es en dirección contraria y se dice que están en oposición de fase o fuera de fase.

Igual que en el resorte, podemos complicar todo introduciendo el amortiguamiento, considerar que no solo tenemos un átomo que está absorbiendo o emitiendo radiación, sino que son muchos. Con estas complicaciones, considerando a los átomos como dipolos, llegamos a la ecuación de dispersión clásica que es muy parecida a la que se obtiene cuánticamente.

Sabemos que aún el circuito más sencillo de un condensador, una bobina y una resistencia, alimentado por una fuente de variación periódica en el tiempo, tiene frecuencias de resonancias. Lo que quizás no sabemos o no nos damos cuenta, es que cuando sintonizamos una radio o un canal de televisión, estamos ajustando la frecuencia natural de oscilación del receptor, con las frecuencias de emisión de la estación de radio o televisión. Es decir, estamos seleccionando frecuencias, para tener resonancia y amplificar la que nos interesa y desechando todas las otras que recibe la

antena. En los albores de la tecnología Heinrich Rudolf Hertz (1857–1894) logró transmitir ondas electromagnéticas y demostró la existencia del campo electromagnético, como un ente físico, observando la consecuente resonancia entre sus dos circuitos RLC (resistencia-inductancia-capacitancia) en su laboratorio, confirmando experimentalmente la teoría del físico escocés James Clerk Maxwell (1831–1879) sobre la identidad de características entre las ondas luminosas y electromagnéticas.

La oscilación de campos magnéticos también puede causar resonancias y una de las principales aplicaciones en medicina es la imagenología por resonancia magnética nuclear. Si bien es una técnica de diagnóstico común, que usa un efecto físico, en el cual se basan muchas técnicas espectroscópicas que nos permiten analizar la estructura fina de la materia y que además lleva el nombre de “resonancia” (Resonancia Magnética Nuclear), su aplicación a la medicina no es por todos entendida. El efecto básico se propuso en 1946 cuando se demostró que algunos núcleos en campos magnéticos intensos, absorben y emiten energía de radiofrecuencia que puede ser analizada por una antena. Esto es porque al someter moléculas y átomos a campos magnéticos estacionarios e intensos, muchos núcleos atómicos, debido al espín nuclear, se comportan como pequeños imanes y aparece entonces el efecto Zeeman que desdobra sus niveles de energía. Cada uno de estos niveles desdoblados de energía corresponden a diferentes orientaciones de los espines de los núcleos respecto al campo magnético. Al igual que en otras técnicas espectroscópicas, la iluminación de la muestra con la frecuencia adecuada de radiación hará que los núcleos pasen de un nivel a otro. La frecuencia de la radiación necesaria para producir este salto de nivel, dependerá del tipo de núcleo, de su entorno químico, del tipo de núcleos presentes en sus cercanías y del campo externo aplicado. Para las imágenes médicas usualmente se utiliza el H del agua de las células, que, si bien absorben y emiten solo uno en un millón, afortunadamente tenemos muchísimos átomos de H y si se quiere más resolución, se puede inyectar otros medios de contraste basados en gadolinio. Sometemos al paciente a un campo externo intenso (0.2–7 teslas) que alinea los imanes y luego, los excitamos con radiofrecuencia que hace que salga y entre en resonancia el nivel de energía y por lo tanto absorba y emita al decaer, también radiofrecuencia. Esta radiación emitida se detecta con antenas y se verá afectada por el entorno. Como además para formar las imágenes usamos los algoritmos de la tomografía, vemos imágenes tridimensionales con cortes y contrastes, pero sin usar radiación ionizante. Pero aún no podemos distinguir entre el H de las distintas partes del cuerpo ya que el imán principal hace que

todos los núcleos que tengan el mismo momento magnético también tengan la misma frecuencia de resonancia. Para lograr información espacial, se adicionan tres bobinas llamadas de gradiente, que generan campos de diferente intensidad que alteran al campo constante y por lo tanto la frecuencia a la que resuenan. Con tres bobinas y por lo tanto con tres frecuencias de resonancia, podemos identificar las distintas partes del cuerpo y saber exactamente de donde proviene la emisión. Como vemos, la instrumentación y la Física Médica van de la mano y sería deseable que el desarrollo de equipos médicos se haga en el país.

De resonancias de sistemas muy pequeños como los átomos o los núcleos, podemos ir a las resonancias de cosas más grandes, como la atmósfera o nubes en la galaxia. Cuando explotó un volcán muy grande y fuerte, perturbó la atmósfera y fue entonces que se pudo medir el período de las oscilaciones, es decir, la frecuencia natural de la atmósfera, que es alterada por la fuerza de la gravedad que varía periódicamente debido fundamentalmente al movimiento de la Luna. Y también en la atmósfera está la resonancia de Shuman, en honor a su descubridor en 1952, el físico alemán Winfried Otto Shuman (1888–1974). Estas resonancias si bien han tenido diversas interpretaciones, son un fenómeno natural en el cual la superficie de la Tierra y la ionósfera, que es una capa de la atmósfera que está entre los 80 y los 500 km, actúan como una cavidad resonante que se explican en el [Capítulo 10](#) de este libro. Al ser excitada por los relámpagos se produce una onda estacionaria cuyo modo fundamental está en 7.8 Hz y su longitud de onda es la de la circunferencia terrestre. La confusión se debe a la similitud de esta frecuencia con las ondas cerebrales alfa de 8–12 Hz que surgen debido a la actividad eléctrica sincrónica y coherente de las células cerebrales, que se producen en la zona del tálamo y son registradas en los electroencefalogramas. Afortunadamente, todas las afectaciones que podrían tener en nuestro estado de ánimo y la percepción han sido descartadas científicamente.

Recientemente han visto que las galaxias de forma de espiral, están recorridas por ondas que se propagan en círculos concéntricos y son llamadas ondas de densidad. Los astrofísicos han encontrado en los discos de estas galaxias que estas ondas se relacionan entre sí con un complejo patrón de resonancias que orquestarían la 'música de las galaxias'. Por último, una de las resonancias "modernas" a la que me quiero referir es al "plasmón de superficie". En realidad esta resonancia siempre estuvo ahí, pero hasta que comenzamos con las nanociencias y las nanotecnologías, no sabíamos de ella y menos la podíamos manipular. Las nanopartículas metálicas al inter-



accionar con un campo eléctrico, el de la luz por ejemplo, resuenan. Dependiendo del tamaño de la nanopartícula, podemos cambiar el color de la luz que se absorbe o refleja y esto se debe a la resonancia de los electrones de la superficie de la nanopartícula con el campo eléctrico de la luz. Si miramos su espectro de absorbancia, veremos un pico dependiendo del tipo y tamaño de la nanopartícula. Por ejemplo, las nano de oro tienen su pico en el verde, las de plata en el azul. Si la nanopartícula cambia de tamaño, por ejemplo, porque se le pegó una proteína, podemos usar esta propiedad para hacer un sensor, monitoreamos el corrimiento del pico y podemos decir cuanta proteína hay y de que tipo.

Todos los fenómenos oscilatorios, de los que hay muchos en la naturaleza, son susceptibles de presentar resonancia explicadas magistralmente por Richard Feynman. Aquí se han visto varios ejemplos de resonancias a diferentes escalas en diferentes sistemas y con diferentes tipos de ondas. La idea principal de este capítulo es mostrar que el fenómeno es el mismo, que hay resonancias de diversos tipos y que las vemos en todos los campos de la Física.

Sin duda la mejor de las resonancias es cuando resonamos con otra persona, pero eso aún no lo podemos explicar con la fórmula (8.3).

PARA SABER MÁS:

- Flores J., Novaro O. Seligman T. H., ***Possible resonance effect in the distribution of earthquake damage in Mexico City***, Nature, Vol. 326, pp. 783-785, United Kingdom, 1987.
- [Capítulo 10](#)
- Feynman, R., “Cap. 23: Resonance”, en ***The Feynman Lectures on Physics, Definitive Edition***, Vol. 1, Addison-Wesley Publishing Co., Estados Unidos, 1963.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

## EL EFECTO TÚNEL... ¿EN SISTEMAS CLÁSICOS?

*Daniel Sahagún\**

El efecto túnel es invocado para explicar la improbable existencia de una partícula en el lado “equivocado” de alguna barrera impenetrable. Es famoso por tratarse de un fenómeno asociado a la mecánica cuántica. Por lo que, a veces, se nos olvida que su origen recae sobre el carácter ondulatorio que manifiestan todas las partículas a esa escala. Sin embargo, nos basta con recordar que existen ondas en sistemas a escalas mucho mayores para concluir que el efecto túnel también debe de existir en sistemas clásicos. Efectivamente, el efecto túnel ha sido extensivamente estudiado en una amplia gama de sistemas incluyendo ondas acústicas y electromagnéticas dentro de todas las regiones del espectro. En este Capítulo nos ocuparemos de entender con detalle el caso óptico, que es visualmente muy atractivo.

### ORIGEN ONDULATORIO

Cuando nos encontramos con una frontera, comúnmente pensamos en la forma de cruzarla. Si tenemos suerte encontramos puertas, hasta puentes; en los casos menos evidentes (aunque dejemos volar más la imaginación) las opciones alternas son pocas. Pueden ser catapultas o túneles, por ejemplo. Si una partícula en movimiento se encuentra con una barrera dentro de la física de la vida cotidiana ocurre uno de tres eventos: (1) la partícula rebota, (2) se queda pegada o (3) perfora la barrera. Para que suceda el caso (3) intuimos que la partícula debe contar con más energía que en los casos (1) y (2), suficiente para romper el material de la barrera. Llamamos *efecto túnel* a toda ocasión en la cual una partícula no tiene suficiente momento para perforar la barrera y aun así, la atraviesa. Esto es equivalente a ver un

---

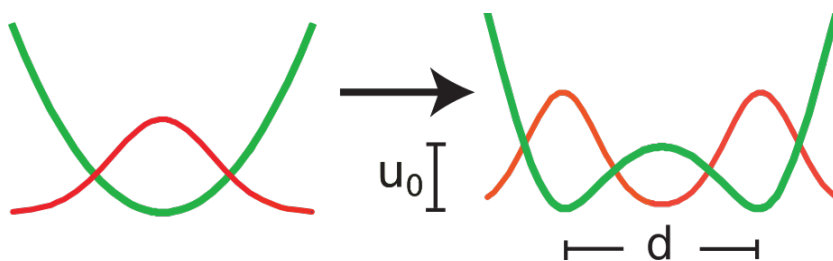
\*Departamento de Física Cuántica y Fotónica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

peatón intentando cruzar el viaducto y de pronto verlo del otro lado sin observar las dificultades implícitas por las cuales tuvo que aventurarse en tan peligrosa empresa. El término “efecto túnel” denota la sorpresa causada por un evento de este tipo. ¿De donde viene la sorpresa en un proceso físico?

Consideremos por un momento el caso cuántico, el más famoso. La primera predicción de tunelaje cuántico fue hecha en 1927 por el físico alemán Friedrich Hund al resolver la ecuación de Schrödinger para una *onda de materia* dentro de un pozo doble de potencial:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x, t). \quad (9.1)$$

En la ecuación (9.1)  $\hbar = h/2\pi$  es la constante de Planck<sup>1</sup>,  $\Psi(x, t)$  la función de onda que describe el estado de la partícula,  $m$  su masa y  $U(x)$  el potencial al cual está sometida.



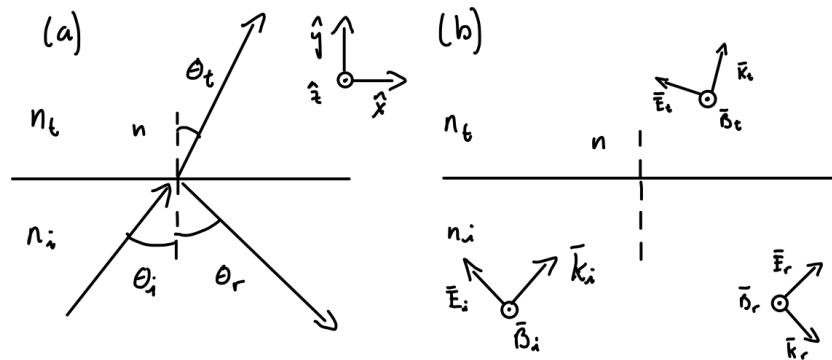
**Figura 9.1:** Ilustración de una partícula atrapada en un pozo de potencial sencillo y en un pozo doble de potencial. El lado izquierdo de la figura ilustra la función de onda de una partícula (rojo) ocupando con más probabilidad el centro de un potencial armónico (verde). En el lado derecho encontramos a la función de onda que corresponde a la misma partícula ocupando un pozo de potencial con una barrera de energía  $u_0$  en el centro.

El problema planteado por Hund está someramente descrito en la figura 9.1. En el lado izquierdo encontramos una partícula que ocupa el estado base de un pozo de potencial unidimensional. Éste puede ser dividido en dos si introducimos una barrera de altura energética  $u_0$ . Al suceder esto, la partícula ocupará con igual probabilidad uno de los dos nuevos pozos. Si al

<sup>1</sup>Una forma sencilla de distinguir entre sistemas clásicos y cuánticos es observar la escala de energía a la que suceden sus procesos. La referencia más recurrida es la constante de Planck  $h = 6.62607004 \times 10^{-34}$  Joules-s, que aparece en el término cinético en la ecuación de Schrödinger (ecuación (9.1)) dando una escala natural para la relación tiempo-energía. Si esta relación es mucho mayor dentro del sistema, estamos observando el mundo clásico.

introducir la barrera  $u_0$  ocurre que la partícula se localiza en el pozo izquierdo por ejemplo, la probabilidad de que ocupe el pozo derecho sigue existiendo. Por lo tanto podría “atravesar” la barrera sin violar las leyes de la física. Aunque en un principio estudiaron el tunelaje dentro del contexto de la física nuclear, muy pronto entendieron que es un fenómeno general presente en la mecánica cuántica como consecuencia del carácter ondulatorio de la materia.

Es de conocimiento casi popular que en el universo existen ondas de diversa naturaleza. Una vez entendido que el origen del tunelaje radica en el carácter ondulatorio de los entes cuánticos, se puede intuir su presencia en sistemas distintos. Efectivamente, sucede en sistemas con prácticamente cualquier tipo de onda. Ha sido estudiado detalladamente en sistemas acústicos y electromagnéticos en sus distintos regímenes de frecuencia. En este capítulo estudiaremos en detalle el caso óptico.



**Figura 9.2:** Los fenómenos de la reflexión y la refracción vistos desde la óptica geométrica (a) y desde la teoría electromagnética (b). En (a) se muestra como un rayo de luz incidente sobre una superficie plana con ángulo  $\theta_i$  se refleja con ángulo  $\theta_r$  y se transmite con ángulo  $\theta_t$ . En (b) se considera a dos campos, uno eléctrico y uno magnético, oscilantes en planos perpendiculares. En (b) hemos escogido a un campo magnético  $\vec{B}$  en dirección entrante hacia la página y a un campo eléctrico  $\vec{E}$  sobre la página. Ambos son ortogonales a la dirección de propagación de la luz dada por  $\vec{k}$ . Los índices  $i, r$  y  $t$  corresponden a las componentes del campo incidente, reflejado y transmitido, en ese orden.

Un poco de historia, las leyes de Snell y de reflexión

El estudio de la luz, que es la región visible en el espectro electromagnético —la óptica— tiene más de mil años de existencia. Alrededor del

año 1000 d. C. el científico iraní Ibn al-Haytham escribió un tratado basado en evidencia experimental, donde le dio a la luz el carácter de lo que comúnmente llamamos rayos. Sus siete tomos tienen varias características impresionantes (ver [Capítulo 14](#)). Una de ellas es que contienen resultados que ponen en evidencia su intuición sobre el comportamiento ondulatorio de la luz. Sin embargo, pasaron quinientos años antes de que los científicos entendieran algunas implicaciones directas, tales como que la luz tiene una velocidad finita que es distinta al propagarse dentro de cada material (transparente) según sus propiedades. Christiann Huygens (1629–1695) desarrolló la primera teoría matemática de la luz basada en un comportamiento ondulatorio. Ésta fue útil para varios de sus sucesores durante los siglos XVIII y XIX como Thomas Young y Augustin-Jean Fresnel. Ellos introdujeron el índice de refracción  $n$  como el cociente entre la velocidad de la luz al atravesar un medio y la velocidad de la luz en el vacío<sup>2</sup>  $c$ :  $n = v/c$ , donde  $c = 3 \times 10^8$  m/s.

La figura 9.2a muestra la frontera que divide dos materiales con índices de refracción distintos,  $n_i$  y  $n_t$ . También muestra a un rayo incidente con un ángulo  $\theta_i$  respecto a la normal  $\hat{n}$  de la superficie en que se refleja con ángulo  $\theta_r$  y a través de la cual también se transmite con ángulo  $\theta_t$ . Si aplicamos el tratamiento ondulatorio de Huygens<sup>3</sup> en este caso llegaremos al siguiente resultado:

$$\frac{\sin \theta_i}{v_i} = \frac{\sin \theta_t}{v_t} = \frac{\sin \theta_r}{v_r}, \quad (9.2)$$

en donde el sub-índice de las velocidades  $v$  corresponde el rayo incidente, transmitido y reflejado, según la letra inicial. Notando que  $v_i = v_r$ , dado que los rayos incidente y reflejado viajan a través del mismo material, podemos concluir que  $\theta_i = \theta_r$ , esta es la *ley de la reflexión*. Ahora, si multiplicamos ambos lados de la primera igualdad en la ecuación (9.2) por  $c$  concluimos que  $n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t$ . Aunque varios científicos llegaron a la misma conclusión de manera independiente, a este resultado internacionalmente lo conocemos como la ley de Snell; en Francia lo conocen como la ley de Descartes.

<sup>2</sup>En ese entonces no se concebía la propagación de una onda en el vacío, pero se consideraba como referencia la velocidad de la luz en el aire, que es un valor muy cercano al de su velocidad en vacío.

<sup>3</sup>El principio de Huygens dice que cada punto sobre la forma de propagación de una onda, el *frente de onda*, se comporta como una fuente puntual de luz con propagación esférica, incluso cuando la trayectoria de la luz es perturbada en el camino, y que la curva envolvente de todas esas ondas esféricas en un instante posterior, constituye el nuevo frente de onda.

## Ángulos críticos en la composición de fotografía sub-acuática



**Figura 9.3:** Foto "Yellow Alien in Blue" de Alessandro Cerè, Islas Derawan, Indonesia. La foto muestra una medusa dorada (nombre científico: *Mastigias papua etpisoni*. Nombre en inglés: Golden jellyfish) dentro de la ventana de Snell. El Dr. Cerè tomó la foto con un lente del tipo ojo de pescado. Estas lentes comprimen el ángulo sólido aparente de la imagen.

Nuestra visión cambia significativamente en los ambientes submarinos debido a la diferencia entre los índices de refracción del aire y del agua. Por eso dicen que los buzos somos un poco exagerados: siempre vemos a los tiburones entre un cuarto y un tercio más grandes de lo que en verdad son. Dentro del mundo subacuático uno de los lugares más interesantes para explorar la fotografía es la superficie. Ahí encontramos más luz natural y vemos en acción a dos fenómenos ópticos relacionados con lo que llamamos el ángulo crítico de la refracción. Ambos pueden ser combinados para hacer composiciones fotográficas impresionantes.

Si al estar sumergidos en el agua miramos hacia arriba nuestro ángulo sólido de visión se reduce de la mitad a un cuarto de esfera. Es a este fenómeno al que, entre la comunidad de fotógrafos submarinos, conocemos como la ventana de Snell. La figura 9.3 muestra una hermosa composición hecha por mi compañero de expediciones, colega y amigo, el físico italiano Alessandro Ceré. En la fotografía encontramos a una medusa rodeada por un círculo luminoso a través del cual la luz que viaja del exterior se transmi-

te al interior del agua. El fondo de este círculo luminoso es el cielo y algunos árboles terrestres. El límite oscuro que observamos es consecuencia de que en el exterior de esta circunferencia la luz deja de transmitirse.

Veamos que nos dice la ley de Snell al respecto. Si nos abstraemos por un momento, nos damos cuenta de que este caso equivale al diagrama que muestra la figura 9.2a pero invertido: la luz viaja más rápido a través del aire que a través del agua, por lo que  $n_i (\approx 1, \text{aire}) < n_t (\approx 1.35, \text{agua de mar})$ . El ángulo de incidencia que establece nuestro ángulo de visión es el más grande posible, que es  $\theta_{i_{\text{máx}}} = 90^\circ$ . Para este ángulo de incidencia la ley de Snell predice un ángulo de transmisión al agua de  $\theta_{t_{\text{máx}}} = \text{arc sen}[n_i/n_t]$ , que llamamos máximo porque no existe un ángulo de incidencia que lo pueda hacer crecer. Consecuentemente, nuestro horizonte observable hacia el exterior del agua se reduce de  $180^\circ$  a aproximadamente  $2\theta_{t_{\text{máx}}} = 95.6^\circ$  dependiendo del mar en el que nos encontremos, puesto que la densidad del agua varía de acuerdo a la concentración salina local. Este es el origen de la ventana de Snell. Es común que los fotógrafos submarinos la utilicen como un marco natural para el sujeto de una composición. Esta fue la técnica que Alessandro utilizó para lograr la imagen mostrada por la figura 9.3.



**Figura 9.4:** Foto “The shark and the diver” de Alessandro Cerè, Islas Derawan, Indonesia. La foto muestra a un tiburón ballena cerca de la superficie y a una buza conviviendo con él. El ángulo con el cual Alessandro tomó la foto nos permite observar la reflexión total interna sobre el interfaz agua-aire.



Para discutir sobre el segundo fenómeno óptico consideremos el mismo diagrama de la figura 9.2a, pero ahora debemos invertir los índices de refracción, ya que el medio incidente es agua y el medio de transmisión es aire, es decir,  $n_i = n_{\text{agua}} > n_t = n_{\text{aire}}$ . En este marco los rayos incidentes ya han sido reflejados en el paisaje submarino por lo que cargan con su información. Si aplicamos nuevamente la ley de Snell encontramos que  $\theta_t = \arcsen \left[ \frac{n_i}{n_t} \sen \theta_i \right]$ . Notemos que  $\theta_t$  estará definido si  $\sen \theta_i \leq n_t/n_i$ . Según esta condición matemática existe un ángulo crítico de incidencia  $\theta_c = \arcsen [n_t/n_i]$  a partir del cual la luz deja de transmitirse del interior al exterior del agua. A esto se le conoce como *reflexión total interna*. En la figura 9.4 encontramos un buen ejemplo de este fenómeno en donde podemos encontrar a un tiburón ballena y a Michelly (novia de Alessandro) disfrutando de un día soleado cerca de las costas de Derawan, una de las islas Indonesas. Alessandro tuvo la precaución de tomar la fotografía en un ángulo tal que aparecieron los reflejos de Mi y del tiburón en la parte interior de la interfaz agua-aire.

Uno puede coordinar a los dos fenómenos mencionados para hacer composiciones fotográficas más complejas gracias a que el ángulo crítico  $\theta_c$  — para la reflexión total interna dentro del agua— coincide con el ángulo máximo de transmisión entre el aire y el agua,  $\theta_{t_{\text{máx}}}$ . Es difícil, pero no imposible, enmarcar primero al sujeto por ser fotografiado con el círculo de Snell y decorar esta composición con el reflejo del paisaje subacuático. ¡He aquí un reto para nuestras habilidades ópticas y marinas!

Una gotera de luz

Examinemos más detalladamente a la reflexión total interna. Para entender lo que sucede con la luz reflejada y refractada es suficiente el concepto de “rayo de luz”. Sin embargo, aunque sea pequeño, cualquier haz tiene una sección transversal finita y la óptica geométrica carece de herramientas para predecir lo que sucede con su energía mientras viaja en paralelo a la superficie a partir de que el ángulo de incidencia supera su valor crítico. La teoría electromagnética nos presenta un panorama más completo.

Consideremos ahora a la figura 9.2b que ilustra a la luz incidente como un campo electromagnético clásico, solución de la ecuación de onda:

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}; \quad (9.3)$$

aquí  $v = c/\sqrt{\epsilon_r}$ , en donde  $\sqrt{\epsilon_r} = n$  es la permitividad relativa del material dentro del cual se propaga el campo. La ecuación de onda se deriva de

las ecuaciones de Maxwell que resumen muy bien la teoría electrodinámica clásica<sup>4</sup>. Predice que la luz está compuesta por un campo eléctrico  $\vec{E}$  y otro magnético  $\vec{B}$ , ambos oscilando en direcciones perpendiculares y propagándose en la dirección ortogonal común,  $\vec{k}_j$  en la figura 9.2b. La ecuación de onda contiene la velocidad a la que se propaga la luz dadas las propiedades del medio y recupera el índice de refracción de la óptica geométrica. El hecho de ser un campo electromagnético impone condiciones a la frontera sobre la superficie que no salen a la luz con la óptica geométrica.

Supongamos por simplicidad que la luz considerada en la figura 9.2b está descrita por una onda plana, solución de la ecuación (9.3):

$$\vec{E}_j = \vec{E}_{0j} e^{i(\vec{k}_j \cdot \vec{r} - \omega t)}. \quad (9.4)$$

Usamos el subíndice  $j = i, r, o t$  para distinguir entre el campo eléctrico incidente, el reflejado o el transmitido,  $\vec{E}_{0j}$  es el vector amplitud y  $\vec{k}_j$  el vector de propagación en cada caso. La ley de Faraday nos dice que las componentes del campo eléctrico paralelas a la superficie son continuas. Consecuentemente podemos recuperar la ley de la reflexión y la ley de Snell en términos de los números de onda:  $k_i \sin \theta_i = k_t \sin \theta_t$ . Veamos qué pasa con el campo eléctrico transmitido. Como muestra la figura 9.2b, su vector de onda cae sobre el plano  $x$ - $y$ , por lo que  $\vec{k}_t = k_{t_x} \hat{x} + k_{t_y} \hat{y}$ . Sus componentes son  $k_{t_x} = k_t \sin \theta_t$  y  $k_{t_y} = k_t \cos \theta_t$ . Usando la ley de Snell y la relación trigonométrica  $\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$ , para el caso de incidencia interna ( $n_i > n_t$ ):

$$k_{t_x} = \frac{n_i}{n_t} k_t \sin \theta_i, \text{ y}$$

$$k_{t_y} = \pm i k_t \sqrt{\left(\frac{n_i}{n_t}\right)^2 \sin^2 \theta_i - 1} \equiv \pm i \beta.$$

De tal manera, el campo transmitido es:  $\vec{E}_t = \vec{E}_{0t} e^{-\beta y} e^{i\left(\frac{n_i}{n_t} k_t x \sin \theta_i - \omega t\right)}$ . Escogemos el signo negativo dentro del primer exponente porque el signo positivo implica un incremento exponencial del campo al propagarse a lo largo del medio con menor índice de refracción. Esto violaría la conservación de energía. La expresión que hemos encontrado para el campo eléctrico

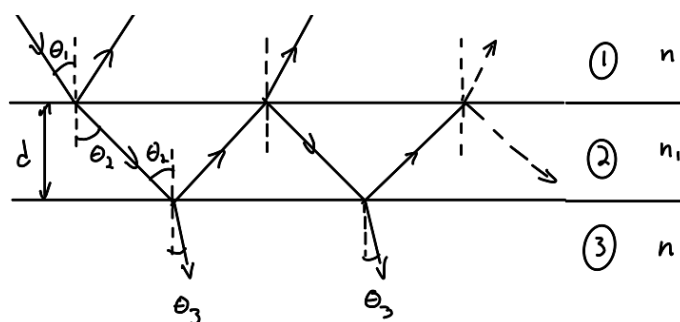
<sup>4</sup>Invitamos al lector a examinar las ecuaciones (9.1) y (9.3) junto con algún libro de texto para entender las similitudes y las diferencias entre el tratamiento teórico para una onda cuántica y una onda clásica. La referencia [1] contiene ambas teorías desde el punto de vista óptico. Alternativamente las referencias [2] y [3] tratan dichas teorías, independientemente, de manera básica y clara.

transmitido nos revela detalladamente lo que sucede en la frontera mientras viaja paralelamente a ella. Cuando el ángulo de incidencia alcanza su valor crítico (el mismo que encontramos mediante la óptica geométrica), el vector de propagación de la luz transmitida forma un ángulo recto con la normal a la superficie; así se conserva también cuando  $\theta_c$  es superado. El campo “no transmitido” oscila cruzando de arriba para abajo al pasar por la frontera. Parte de él viaja normalmente inmerso dentro del campo con índice de refracción mayor. La otra parte penetra dentro del material menos denso. Nuestro resultado dice que es un campo oscilante cuya *constante de propagación* depende del ángulo de incidencia y cuya amplitud desvanece exponencialmente al propagarse a través del medio con menor índice de refracción.

#### Efecto túnel clásico

Hemos visto que, al penetrar en el medio ópticamente menos denso (con índice de refracción menor), el campo óptico decae exponencialmente. Para tener una mejor idea de lo que sucede calculemos la *profundidad de penetración* para un sistema donde el medio más denso sea BK7, un cristal muy usado para construir sistemas ópticos ( $n_i = 1.52$ ) y donde el material menos denso sea el aire ( $n_t \approx 1$ ). La profundidad de penetración  $y_o$  se define como la distancia que logra introducirse un campo electromagnético antes de que su amplitud sea reducida por un factor de  $e^{-1}$ ;  $y_o = 1/\beta$  en nuestro caso. Nótese que esta distancia depende de la longitud de onda, del ángulo de incidencia y del ángulo crítico, que es  $\theta_c = 41.1^\circ$  para el sistema en consideración. El lector podría corroborar que si escogemos un rojo de, digamos  $\lambda = 670$  nm, entonces  $y_o = 147.9$  nm; es razonable pensar que para este ejemplo la mitigación del campo será prácticamente completa a distancias que son comparables con tan solo una longitud de onda de la luz incidente. Sin embargo, en esta sección veremos que, aún dejando al campo óptico decaer a lo largo de distancias del orden de  $\lambda$ , en algunos casos es posible rescatar una parte de éste para que continúe propagándose al agregar un tercer medio de mayor índice de refracción que el segundo. La penetración de la onda evanescente en un tercer material fue estudiada por los ópticos de antaño: Newton [4], Fresnel, Verded, Young, Huygens, Biot, Stokes y Quicke. En 1902 E. E. Hall citó a todos ellos en su muy cuidadoso trabajo experimental y teórico sobre el tema [5]. Este es el efecto túnel en la óptica clásica, también conocido como *reflexión total interna frustrada*.

Para entenderlo agreguemos una segunda interfaz a nuestro experimento pensado, así como se muestra en la figura 9.5. Al incidir con ángulo  $\theta_1$



**Figura 9.5:** Ilustración del sistema básico para lograr la reflexión interna frustrada. Comprende tres materiales separados por dos interfaces, donde el material 2 tiene menor índice de refracción que los medios 1 y 3. Si un haz incide con un ángulo  $\theta_1 < \theta_c$  sobre la interfaz 1-2, éste se divide en una porción reflejada y otra refractada con ángulos respectivos  $\theta_1$  y  $\theta_2$ . Al encontrarse con la interfaz 2-3 el rayo refractado incide y se refleja con el mismo ángulo  $\theta_2$  y se refracta con un ángulo distinto  $\theta_3$ . La luz que logra quedarse a dentro de la franja hecha del material 2 continúa rebotando en el interior hasta ser totalmente atenuada por las sucesivas reflexiones y transmisiones a través de las dos superficies. Si  $\theta_1 \geq \theta_c$ , ocurre reflexión total interna en la interfaz 1-2, pero  $d$  es suficientemente pequeña, parte de la onda incidente desde el medio 1 logra propagarse hasta el medio 3.

sobre la interfaz 1-2 la luz se refleja parcialmente y el resto se refracta con un ángulo  $\theta_2$ . Con este mismo ángulo incide sobre la interfaz 2-3 que, a su vez, la refleja y refracta. La luz reflejada eventualmente regresa a la interfaz 1-2 donde el proceso se repite. Este es un sistema muy parecido a una cavidad Fabry-Perot, para la cual sabemos bien como calcular la cantidad de luz transmitida para cada componente de polarización del campo óptico, paralela y perpendicular a la interfaz. A saber, los coeficientes de Fresnel permiten calcular la tasa entre la amplitud de la luz reflejada e incidente  $r_{\parallel, \perp} = (E_{0r}/E_{0i})_{\parallel, \perp}$ ; y la tasa entre la amplitud de la luz transmitida e incidente  $t_{\parallel, \perp} = (E_{0t}/E_{0i})_{\parallel, \perp}$ . Con ello es posible obtener la amplitud total de la luz transmitida y reflejada a partir del campo eléctrico original calculando estos coeficientes para cada interfaz y utilizando las relaciones de Stokes

$$t_{ij}t_{ji} + r_{ij} = 1$$

$$r_{ij} = -r_{ji},$$

en donde los índices indican el orden de los materiales,  $ij = 12, 21$  o  $ij = 23, 32$ , según la frontera bajo análisis. La información sobre el campo estará completa una vez que obtengamos la fase entre los múltiples rayos de luz

reflejándose y transmitiéndose a través de las superficies que han recorrido distintos caminos ópticos [1, 2]. Si suponemos que los materiales 1 y 3 son el mismo, es decir  $n_1 = n_3 = n$ , y que  $n_2 = 1$ , los cálculos se simplificarán considerablemente [6]. En este caso encontraremos que la *transmitancia* o proporción de energía transmitida a través del sistema completo es

$$T_{(\perp,\parallel)} = \frac{1}{\alpha_{(\perp,\parallel)} \sinh^2 \xi + 1} \quad (9.5)$$

en donde los coeficientes  $\alpha_{(\perp,\parallel)}$ , definidos para las componentes perpendicular y paralela del campo, son

$$\alpha_{\perp} = \left[ \frac{n^2 - 1}{2n} \right]^2 \left[ \frac{1}{\cos^2 \theta_1 (n^2 \sin^2 \theta_1 - 1)} \right]$$

y

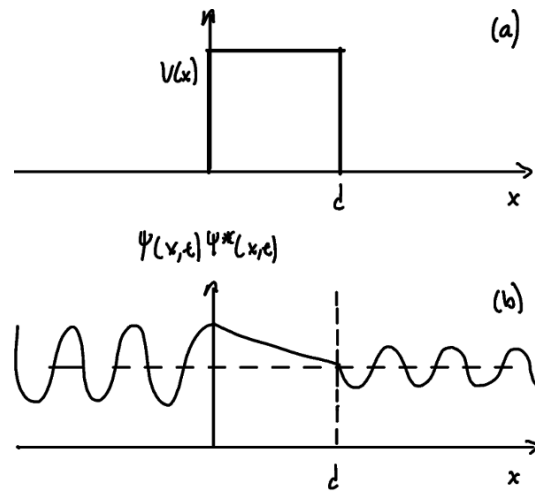
$$\alpha_{\parallel} = \alpha_{\perp} [(n^2 + \sin^2 \theta_1) - 1]^2;$$

el argumento  $\xi$  del seno hiperbólico es el mismo para cualquiera de las dos componentes

$$\xi = \left( \frac{2\pi d}{\lambda} \right) (n^2 \sin^2 \theta_1 - 1)^{1/2}.$$

Estos tres parámetros determinan la cantidad de energía transmitida en términos de las propiedades de los materiales y el ángulo de incidencia. Dentro de la referencia [6] presentan varias combinaciones de materiales y ángulos para las cuales las dos componentes de la transmitancia  $T_{(\perp,\parallel)}$  aún cuentan con una porción importante de la energía para  $d \approx \lambda$ . Es interesante leer dicha referencia por ser la primer demostración cuantitativa del efecto túnel clásico y fue hecha con un experimento simple de implementar.

Para entender el aspecto matemático de la analogía entre el tunelaje clásico y el cuántico es muy útil recordar un ejercicio que es común entre los cursos básicos de mecánica cuántica: Calcular el coeficiente de transmisión  $T$  para una partícula de masa  $m$  y con energía  $E$  atravesando una barrera de potencial cuadrada con altura  $V_0$  ( $> E$ ) y grosor  $d$ . Ilustramos este sistema con un dibujo en la figura 9.6a. La transmisión  $T$  en este caso está dada por la probabilidad que tiene la partícula de existir al otro lado de la barrera calculada usando el módulo de su función de onda. Como lo ilustra el dibujo en la figura 9.6b esta probabilidad decae exponencialmente cuando la partícula se encuentra con la barrera de potencial pero, si  $d$  es suficientemente



**Figura 9.6:** Ilustración del caso cuántico de tunelaje matemáticamente equivalente a la reflexión total interna frustrada. (a) muestra a una barrera de potencial con altura  $V(x)$  y longitud  $d$ . El coeficiente de transmisión  $T$  de una partícula con masa energía  $E$  se calcula tomando el producto su función de onda y el conjugado. (b) muestra como esta probabilidad decae exponencialmente adentro de la barrera pero continúa con un valor finito después de recorrer completamente el grosor de la barrera que mide una distancia  $d$ .

perqueña, existe una parte de ella que sobrevive para continuar su camino del otro lado. Este decaimiento exponencial es análogo al decaimiento de la onda evanescente analizado en la sección anterior. Además el coeficiente de transmisión en este caso es (ver por ejemplo [7]):

$$T = \frac{1}{1 + V_0 \sinh^2 \gamma d / 4E(V_0 - E)} \quad (9.6)$$

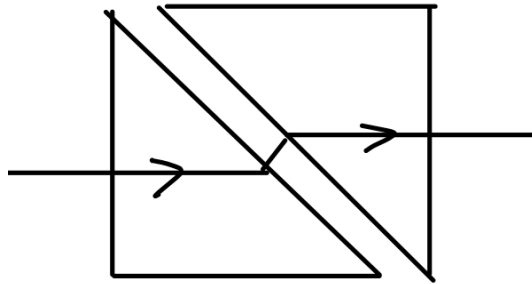
en donde

$$\gamma = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

Las ecuaciones (9.5) y (9.6) (componente perpendicular) son idénticas si hacemos coincidir las propiedades de los dos sistemas usando las siguientes correspondencias: (1)  $mE/\hbar^2 \rightarrow n^2/4\lambda^2$  y (2)  $mV_0/\hbar^2 \rightarrow (n^2 - 1)/2\lambda^2$  [6]. Por lo tanto existen circunstancias físicas reales bajo las cuales los dos sistemas, el clásico y el cuántico, son equivalentes matemáticamente.

Actualmente el manejo de la luz se ha vuelto importante en extremo. Su manipulación nos es útil para un sinnfín de aplicaciones en las telecomu-

nicaciones, manejo de información, medicina, agricultura, por mencionar algunos ejemplos. La reflexión total interna frustrada, o efecto túnel clásico, es uno de los fenómenos que son útiles con este fin. Un ejemplo es el atenuador óptico. Éste consiste en un cubo transparente partido a la mitad, cuyas partes son colocadas de manera que sus hipotenusas queden paralelas, como se muestra en la figura 9.7. Con este arreglo es posible disminuir la intensidad de un haz sin modificar el resto de sus propiedades variando la distancia que separa a los dos prismas. Lo cual, hemos visto en este capítulo, sería equivalente a variar la altura y el grosor de una barrera de potencial susceptible a la penetración de partículas cuánticas.



**Figura 9.7:** Bosquejo de un atenuador óptico. Consiste en un bloque de material transparente cortado siguiendo el ángulo crítico de reflexión total interna. La luz incidente de izquierda a derecha sufre de una atenuación exponencial al recorrer el espacio antes de ser transmitido a través de la superficie del segundo bloque.

## GLOSARIO

- **Constante de propagación:** Módulo del vector de propagación.
- **Frente de onda:** Lugar geométrico en que los puntos del medio son alcanzados en un mismo instante por una determinada onda.
- **Onda de materia:** Partícula con masa cuya energía permite que sus características cuánticas sean evidentes.

## REFERENCIAS

- [1] I. R. Kenyon, *The light fantastic: A modern introduction to classical and quantum optics*. Oxford [England]; New York: Oxford University Press, 2008.

- [2] E. Hecht, *Óptica*. Addison Wesley, 1998.
- [3] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, 2 edition. Cambridge: Cambridge University Press, ago. de 2016.
- [4] I. Newton, *Opticks*, English. Estados Unidos: Dover Publications, 1952.
- [5] E. E. Hall, «The Penetration of Totally Reflected Light into the Rarer Medium», *Physical Review (Series I)*, vol. 15, n.º 2, págs. 73-106, ago. de 1902.
- [6] S. Zhu, A. W. Yu, D. Hawley y R. Roy, «Frustrated total internal reflection: A demonstration and review», *American Journal of Physics*, vol. 54, n.º 7, págs. 601-607, jul. de 1986.
- [7] R. Eisberg y R. Resnick, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*, 2nd edition. New York: John Wiley & Sons, 1985.



## GUÍAS DE ONDA Y RESONADORES

*Citlali Sánchez Aké\**

Como sabemos, las ondas electromagnéticas son una manifestación de las llamadas ecuaciones de Maxwell, que a su vez son la forma condensada de la teoría electromagnética. De manera similar a la materia, estas ondas pueden confinarse en el espacio en una, dos o tres dimensiones. En los primeros dos casos hablamos de guías de ondas, mientras que si el confinamiento es en tres dimensiones se está considerando un resonador. Como todos los fenómenos ondulatorios, el confinamiento se puede dar en escalas extremadamente diferentes; desde los plasmones localizados a escala nanométrica, hasta la guía de ondas de radiofrecuencia entre la superficie terrestre y la ionósfera. Las aplicaciones de este efecto incluye notables avances tecnológicos, como las comunicaciones por fibra óptica y la fabricación de chips ópticos, entre otros.

### CONFINAMIENTO DE ONDAS

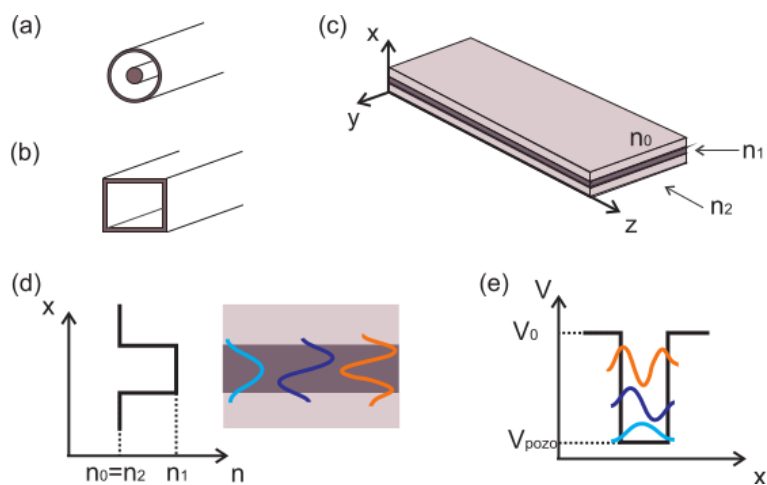
Las guías de ondas son aquellas sorprendentes estructuras en las que las ondas son transmitidas siguiendo una trayectoria definida en lugar de propagarse libremente en un medio. Los estetoscopios utilizados por los médicos y los tubos de los órganos musicales son ejemplos de guías de onda acústicas. En ambos casos, el sonido está confinado a seguir una trayectoria particular en una dimensión, en el primer ejemplo desde el pecho del paciente hasta los oídos del doctor. Por supuesto, el concepto de guía de onda abarca las ondas electromagnéticas y ese caso considera también el confinamiento en una o dos dimensiones y un amplio rango de longitudes de onda.

---

\*Departamento de Micro y Nanotecnologías, Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Universidad Nacional Autónoma de México.

Pero ¿cómo se atrapan las ondas? ¿cómo son las fronteras físicas que delimitan el espacio para su propagación? Básicamente se trata de un mecanismo de reflexión ya sea por contraste extremo en índices de refracción, por reflexión interna total o por reflexión de Bragg.

Las guías de onda que consisten en dos hilos conductores, ya sea paralelos o en la configuración de cable coaxial, son probablemente las que tienen mayor antigüedad en su modelación matemática y su uso para comunicaciones. Un cable coaxial consiste en un hilo o cilindro conductor dentro de otro cilindro conductor hueco, ambos centrados en el mismo eje y separados por un medio dieléctrico como se muestra en la figura 10.1a. Los conductores actúan como frontera física de modo que la onda se propaga entre los mismos, en dirección perpendicular a las oscilaciones de las componentes eléctrica y magnética, es decir, el modo dominante de propagación es transversal electromagnético (TEM). Las guías más simples no son otra cosa más que un tubo de material conductor vacío o relleno con un dieléctrico, con sección transversal rectangular, circular o incluso asimétrica (ver figura 10.1b). Las paredes conductoras del tubo confinan la onda al interior por reflexión en la superficie para satisfacer las condiciones de frontera que obedecen los campos electromagnéticos, es decir que no hay componente tangencial del campo eléctrico en la superficie del conductor.



**Figura 10.1:** (a) Cable coaxial, (b) guía de ondas rectangular, (c) guía plana compuesta de materiales dieléctricos, (d) índices de refracción en la guía y esquema de la propagación de modos, (e) ilustración de modos correspondientes a una partícula en un pozo de potencial.

Para frecuencias en el rango óptico, es más favorable guiar la radiación electromagnética en estructuras dieléctricas, en donde el confinamiento ocurre por reflexión interna total entre las interfaces dieléctricas. Recordemos que para que una onda se refleje totalmente en una frontera entre dos medios dieléctricos, ésta debe incidir desde el medio ópticamente más denso (con mayor índice de refracción) formado con respecto a la normal, un ángulo mayor que el ángulo crítico. La reflexión interna total va acompañada de campos evanescentes que penetran en el medio circundante con menor índice de refracción, este fenómeno es similar al tunelaje de una partícula a través de una barrera de potencial (véase el [Capítulo 9](#)). Sin embargo, para recubrimientos suficientemente anchos, las ondas evanescentes son fuertemente atenuadas de modo que no alcanzan las fronteras exteriores.

#### COMPARACIÓN CON EL CONFINAMIENTO DE PARTÍCULAS

Consideremos la guía de onda plana mostrada en la figura [10.1c](#), en donde el índice de refracción de la capa intermedia es  $n_1$ , mientras que las otras dos capas con índices  $n_0$  y  $n_2$  actúan como recubrimiento y sustrato respectivamente. Dado que las tres capas son infinitas, el problema puede simplificarse a una dimensión en donde sólo se considera la distribución de los campos  $E$  y  $H$  a lo largo del eje  $x$  y la propagación de la onda en dirección  $z$ . En ese caso, las ecuaciones de Maxwell se simplifican a la ecuación unidimensional de Helmholtz, para el campo eléctrico transversal  $E_y$

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + (k_0^2 n^2 - \beta^2) E_y = 0, \quad (10.1)$$

donde  $\beta$  es la constante de propagación,  $n$  el índice de refracción y  $k_0$  el número de onda de la propagación en vacío. La solución de esta ecuación es posible solamente para un conjunto discreto de valores  $k_c^2 = k_0^2 n^2 - \beta^2$ , donde  $k_c$  es conocido como el número de onda de corte. Esto significa que las ondas confinadas tienen un conjunto discreto de modos de propagación posibles. ¡Sí, al igual que una partícula cuántica atrapada en un pozo de potencial tiene un conjunto discreto de estados energéticos accesibles! Recordemos que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de una partícula de masa  $\mu$  en un pozo de potencial  $V(x)$ , describe la función de onda unidimensional de la partícula  $\Psi(x)$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \Psi(x)}{dx^2} + V(x) \Psi(x) = E \Psi(x), \quad (10.2)$$

donde  $\hbar$  es la constante de Planck y  $E$  la energía de la partícula. La similitud entre las ecuaciones (10.1) y (10.2) es directa, para (10.1) la solución son los modos permitidos en la guía mientras que para (10.2) son los estados posibles de energía de la partícula. Las figuras 10.1d y 10.1e muestran una posible representación de los modos correspondientes para la guía y la partícula respectivamente. En este último caso, los niveles de energía dependen de las características del pozo y del estado inicial de la partícula. En el caso de las ondas en una guía, las condiciones de frontera asociadas a la geometría de la guía y el mecanismo de confinamiento, determinan los valores permitidos de  $k_c$ , que definen los modos de propagación de la onda confinada. Estos modos son ortogonales y se propagan en la guía con distinta velocidad de grupo, manteniendo su distribución espacial y polarización. Además, cada uno tiene asociada una frecuencia y longitud de onda de corte,  $\omega_c$  y  $\lambda_c$ , respectivamente. Un modo con frecuencia de corte  $\omega_c$  se propagará por una guía solamente si  $\omega > \omega_c$ , pues en caso contrario la onda se atenuará exponencialmente a lo largo de la dirección de la guía. Para ahondar en el tema de confinamiento de partículas y guías de onda de materia consúltese las referencias [1, 2].

Los sistemas de guías de onda son operados en rangos de frecuencia que aseguran que solo el menor modo puede propagarse. Si la frecuencia  $\omega$  es mayor que la frecuencia de corte de varios modos, entonces todos se propagarán por la guía. Es usual utilizar guías con frecuencias justo por arriba de la frecuencia de corte del menor modo, pero por debajo de la frecuencia de corte de todos los demás para asegurar la propagación monomodal. Este es un concepto general para las guías de onda, no obstante, en algunas de ellas como las fibras ópticas, el menor modo no tiene frecuencia de corte por lo que el ancho de banda se determina por  $\omega_c$  del segundo modo.

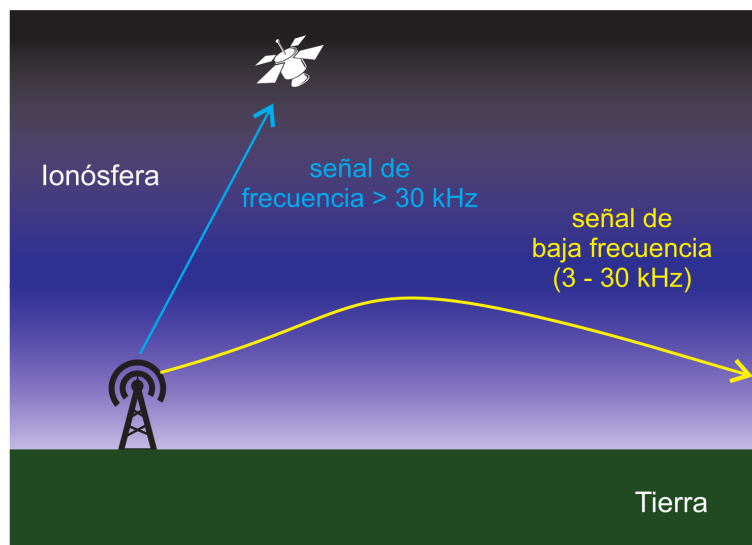
La selección de la estructura de una guía de onda depende del ancho de banda de frecuencia de operación, la tolerancia de las pérdidas en la estructura y la potencia que la guía debe transmitir. El ancho de banda dependerá de los modos de propagación como ya mencionamos. La potencia total transportada por los campos a lo largo de la guía se puede obtener de manera usual, integrando el vector de Poynting en la sección trasversal de la guía de ondas. Las pérdidas se pueden estimar incorporando un factor de atenuación en el número de onda, que en guías de onda conductoras se deben principalmente a pérdidas óhmicas en el medio dieléctrico entre las paredes o bien en las paredes mismas. En las guías dieléctricas, las pérdidas se deben a absorción del material y al esparcimiento provocado por imperfecciones.

## EJEMPLOS DE GUÍAS DE ONDA PARA DIFERENTES FRECUENCIAS

Mencionemos algunos ejemplos de guías de ondas electromagnéticas. Nosotros mismos vivimos “dentro” de una guía de ondas de baja frecuencia cuyas fronteras conductoras son la superficie de la Tierra y la ionósfera. Esta guía confina ondas electromagnéticas cuya frecuencia se encuentra aproximadamente en el rango de 3–30 kHz, que se usan para comunicaciones de largo alcance y sistemas de navegación terrestre. La ionósfera es la capa de la atmósfera que yace entre 75–400 km sobre la superficie terrestre, constituida por una mezcla de partículas neutras (moléculas como  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $NO$  y átomos como  $O$ ,  $Ar$ ,  $H$ ), partículas ionizadas ( $O_2^+$ ,  $N_2^+$ ,  $NO^+$ ) y electrones libres, que juntas forman un plasma. Tal ionización es producida principalmente por la radiación solar en el extremo UV y por rayos cósmicos. La ionósfera, como todo plasma, interactúa con las ondas electromagnéticas de un modo distinto que un gas. Cuando una onda EM se propaga en un plasma, los electrones libres empiezan a oscilar tratando de seguir la frecuencia de la onda. Si la frecuencia es baja, los electrones en la ionósfera oscilan en resonancia con la frecuencia de la onda incidente y reemiten la señal de regreso a la superficie de la Tierra, haciendo un efecto de reflexión como se ilustra de manera esquemática en la figura 10.2. Por el contrario, si la frecuencia es alta, los electrones no son capaces de seguir la onda incidente y entonces ésta puede atravesar el medio. Por ejemplo, si enviamos una onda con frecuencia de 10 MHz hacia arriba en la vertical, ésta no se reflejará y escapará al espacio exterior (por eso sí podemos comunicarnos con los satélites). Por supuesto, el efecto de reflexión depende del ángulo de incidencia de la onda y la densidad electrónica del plasma. Esta última varía con la altura en la ionósfera, misma que a su vez depende de la hora del día (pues por la noche no recibe radiación solar), estación de año, fase solar, etc. Por ejemplo, la altura de la capa más baja de la ionósfera respecto a la superficie terrestre puede variar aproximadamente 15–20 km entre el día y la noche [3].

Para el guiado de ondas de frecuencias más altas es necesario utilizar materiales conductores. Se usan cables coaxiales para frecuencias debajo de 3 GHz pues por arriba de ese valor, las pérdidas son muy grandes. La atenuación, que depende de la frecuencia, es aproximadamente 3 dB por cada 100 m a 100 MHz, 10 dB/100 m a 1 GHz y 50 dB a 10 GHz [4]. La potencia transmitida en estos cables está limitada principalmente por calentamiento, siendo alrededor de 1 kW a 100 MHz, pero disminuye drásticamente a 200 W a 2 GHz. La operación monomodal obliga a que el diámetro del cable

conductor interior sea reducido, lo que ocasiona la disminución de la potencia que puede ser transmitida. Las guías de onda rectangulares huecas se utilizan para frecuencias mayores a 3 GHz (microondas) pues pueden transferir potencias altas, por ejemplo, una onda de 5 GHz de frecuencia y 1 MW de potencia tiene una atenuación de alrededor de 4 dB/100 m [4].



**Figura 10.2:** La ionósfera de la Tierra actúa como reflector de ondas electromagnéticas de baja frecuencia (aproximadamente 3–30 kHz).

En contraste con los ejemplos anteriores, las fibras ópticas operan en frecuencias en el IR, visible y una parte del UV. Típicamente transfieren potencias del orden de mW, su atenuación es muy baja, del orden de 0.2 dB/km y operan en configuración monomodal y multimodal. Debido a este nivel de baja atenuación, las fibras ópticas reemplazaron desde hace años los cables coaxiales de cobre como medios de transmisión para comunicaciones terrestres y sub-océánicas. Además de transmitir datos con bajas pérdidas y en un ancho relativamente grande frecuencias, las guías ópticas se utilizan como componentes para generar, enfocar, separar, aislar, interrumpir la propagación, polarizar y modular la luz. Un substrato que permite manipular una o varias de estas funciones se conoce como chip óptico y constituye una nueva versión de los circuitos electrónicos integrados. Naturalmente, existe un interés importante en reducir el tamaño de los chips ópticos para aumentar su velocidad de operación y disminuir la potencia consumida. Sin embargo, si reducimos indefinidamente el diámetro de una guía óptica,

el mecanismo de guiado será poco eficiente debido a que los modos característicos dejarán de estar confinados por el límite de difracción y entonces se reducirá su intensidad. Esto representa una restricción fundamental para miniaturizar las guías de onda.

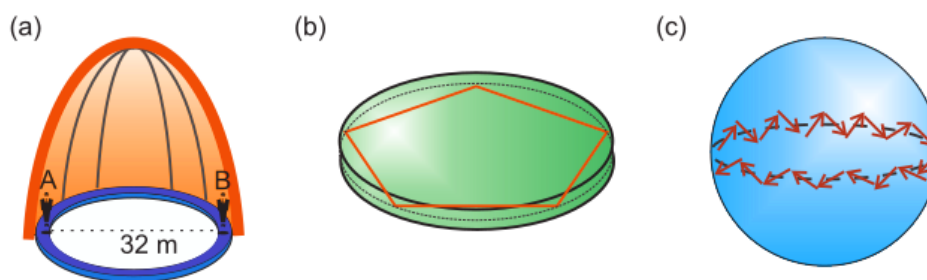
Una solución ideal para reducir las dimensiones de los chips, es construir circuitos utilizando los llamados polaritones plasmónicos de superficie, que son ondas electromagnéticas acopladas a la oscilación de cargas en interfaces metal/dieléctrico. Los polaritones plasmónicos pueden eludir el límite de difracción y lograr la localización de energía electromagnética en regiones nanométricas, considerablemente más pequeñas que la longitud de onda de la luz en el material. El campo electromagnético perpendicular a la interface entre el metal y el dieléctrico decae exponencialmente con la distancia desde la superficie del metal, mientras que mantiene la propagación de largo alcance de la energía electromagnética a lo largo de la superficie. A esta combinación se le llaman guías de onda plasmónicas y en los últimos años se han usado diferentes configuraciones como cadenas de nanopartículas metálicas, películas metálicas, bloques alternados metal/dieléctrico/metal, etcétera [5]. El progreso actual de los circuitos plasmónicos aún no alcanza el nivel deseado en cuanto a su fabricación, integración de varios componentes y pérdidas de energía, no obstante, el horizonte es prometedor y seguramente, no dejará de sorprendernos.

## RESONADORES

Hasta ahora se han mencionado múltiples ejemplos de confinamiento de ondas en una o dos dimensiones, pero si el confinamiento es en tres dimensiones decimos que se trata de un resonador. Un resonador es un arreglo que confina y almacena ondas de ciertas frecuencias. Un ejemplo es un sistema óptico en el que la luz se refleja múltiples veces en las paredes sin posibilidad de escape. En seguida viene a la mente el resonador Fabry-Perot que consiste en dos superficies planas reflejantes dispuestas paralelamente con un haz de luz atrapado. La geometría de las paredes y su separación determinan la distribución de intensidad del campo eléctrico transversal a la dirección de propagación, llamados modos transversales EM. Asimismo, las múltiples reflexiones permiten que solo un conjunto discreto de frecuencias, conocidas como frecuencias de resonancia o modos longitudinales “sobrevivan” en la cavidad debido al fenómeno de interferencia. Nótese que al igual que con las guías de onda y el pozo de potencial, son las condiciones a la frontera impuestas por la geometría del confinamiento, las que dictan

cuáles son los modos de propagación en un resonador.

Existen múltiples configuraciones de resonadores desde el punto de vista del tipo de la frontera física que impone el confinamiento, su geometría, el tipo de onda y su rango de frecuencias. Un ejemplo muy interesante es el grupo de resonadores donde las ondas dibujan trayectorias cuasi circulares debido a múltiples reflexiones en superficies curvas como anillos, cilindros o esferas (ver figura 10.3). Los modos en estos resonadores, conocidos como “whispering gallery modes”, corresponden a las ondas que después de dar una vuelta completa y llegar al mismo punto tienen la misma fase y por lo tanto interfieren constructivamente consigo mismas formando ondas estacionarias. Estas resonancias específicas, que sabemos son las soluciones posibles impuestas por las condiciones a la frontera, dependen como siempre de la geometría del resonador. Por supuesto, este concepto también tiene su homólogo en ondas de materia para el confinamiento de átomos [6].



**Figura 10.3:** (a) Esquema de una estructura arquitectónica en Londres en donde se presenta el fenómeno “whispering gallery modes”, el sonido va del punto A a B en una trayectoria tangente a las paredes. Aproximación óptica geométrica de la propagación de modos en un disco (b) y en una esfera (c), la trayectoria ecuatorial en zigzag ilustra cómo sería la trayectoria óptica de los modos.

El término “whispering gallery modes” fue utilizado por primera vez por Lord Rayleigh en el siglo XIX para describir la propagación de ondas acústicas a lo largo de una delgada capa de aire paralela a la superficie cóncava del domo de una catedral en Londres [7]. Se sabía que un murmullo susurrado en un punto del domo podía ser escuchado claramente en el lado opuesto del mismo a pesar de que había una larga distancia entre la persona murmurando y el escucha. La “Capilla de los Secretos” en el exconvento del Desierto de los Leones en la ciudad de México tiene una estructura arquitectónica que funciona como una cavidad con “whispering modes”. Al parecer el objetivo de esta estructura era permitir la comunicación en voz



baja entre dos monjes evitando el contacto físico. Actualmente, las cavidades resonantes con esta geometría son de gran interés por su posible aplicación como dispositivos ópticos. Su funcionamiento como sensores se basa en detectar el efecto de agentes externos a la resonador sobre sus modos resonantes. Sin embargo, al igual que con los chips ópticos, el reto sigue siendo su fabricación y acoplamiento con otros componentes optoelectrónicos.

PARA SABER MÁS:

- Feynman, R. P., Leighton, R. B., Sands, M., *The Feynman Lectures on Physics Vol. II*, Adison-Wesley, 1964.
- Cao Z., Yin C., *Analogy Between Quantum Mechanics and Optics. In: Advances in One-Dimensional Wave Mechanics.*, Springer, Berlin, Heidelberg, 224 pp, 1993.
- Saleh, B.E.A., Teich, M.C., *Fundamentals of Photonics*, 2a ed., Wiley, 1200 pp, 2007.

REFERENCIAS

- [1] B. Eiermann, P. Treutlein, T. Anker y col., «Dispersion Management for Atomic Matter Waves», *Physical Review Letters*, vol. 91, n.º 6, pág. 060 402, ago. de 2003.
- [2] I. Lesanovsky y W. von Klitzing, «Time-Averaged Adiabatic Potentials: Versatile Matter-Wave Guides and Atom Traps», *Physical Review Letters*, vol. 99, n.º 8, pág. 083 001, ago. de 2007.
- [3] M. Indira Devi, I. Khan y D. N. Madhusudhana Rao, «A study of VLF wave propagation characteristics in the earth-ionosphere waveguide», *Earth, Planets and Space*, vol. 60, n.º 7, págs. 737-741, jul. de 2008.
- [4] S. J. Orfanidis, «Electromagnetic waves and antennas», 2002. dirección: <https://www.ece.rutgers.edu/~orfanidi/ewa/> (visitado 12-03-2020).
- [5] Y. Fang y M. Sun, «Nanoplasmonic waveguides: Towards applications in integrated nanophotonic circuits», *Light: Science & Applications*, vol. 4, n.º 6, e294-e294, jun. de 2015.

- [6] H. Mabuchi y H. J. Kimble, «Atom galleries for whispering atoms: Binding atoms in stable orbits around an optical resonator», *Optics Letters*, vol. 19, n.º 10, págs. 749-751, mayo de 1994.
- [7] A. Matsko y V. Ilchenko, «Optical resonators with whispering-gallery modes-part I: Basics», *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 12, n.º 1, págs. 3-14, ene. de 2006, Conference Name: IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics.

**ONDAS DE ESPÍN***Guillermo Monsivais\**

Una de las áreas de más interés en la física y la tecnología durante los últimos años ha sido la espintrónica. Como muestra de ello basta mencionar que el Premio Nobel de Física 2007 fue otorgado a Peter Grünberg y Albert Fert por sus estudios en esta rama de la ciencia. En la actualidad existen varias aplicaciones de ella y de uno de sus subtemas: las ondas de espín, pero se espera que vendrán muchísimas más, sobre todo en el área de procesamiento de información. La espintrónica, a diferencia de la electrónica que sólo se interesa por las propiedades de la carga del electrón, estudia tanto las propiedades de su carga como las de su momento magnético. Por esta razón a la espintrónica se le llama alternativamente *magnetoelectrónica*.

Presentamos primero el concepto de momento dipolar magnético. Aunque una descripción rigurosa del magnetismo sólo puede hacerse dentro del marco de la física cuántica, muchos aspectos cualitativos se pueden entender en términos de análogos clásicos como los que se discutirán a continuación. Considérese una corriente eléctrica  $I$  que circula sobre una espira alrededor de un cierto eje paralelo al vector unitario  $\hat{e}$  (ver figura 11.1). Esta corriente producirá en sus alrededores un campo magnético semejante al de un imán en forma de barra cuyo eje es paralelo al vector  $\hat{e}$  y tal que su polo norte está en el lado del eje que “ve” a la corriente circular en sentido contrario al de las manecillas del reloj (esta afirmación no es válida en las zonas muy cercanas a la espira). Usualmente una manera conveniente de describir matemáticamente el campo magnético producido por esta espira es asociándole una cantidad vectorial  $\mathbf{m}$  llamada *momento dipolar magnético*. Éste se define como un vector cuya magnitud es igual al producto del área

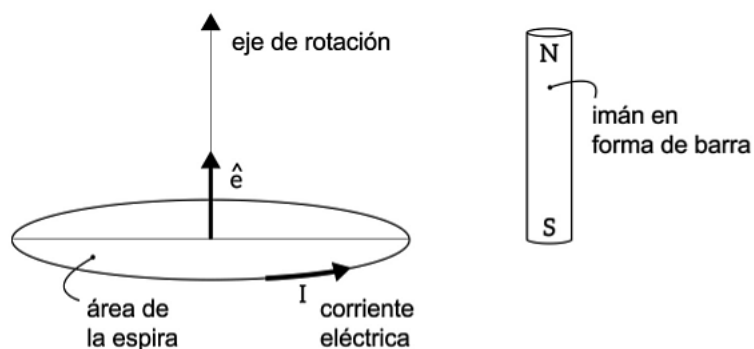
---

\*Departamento de Estado Sólido, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

A de la espira por la corriente  $I$  y su dirección es la del eje de rotación, es decir,

$$\mathbf{m} = AI \hat{\mathbf{e}}. \quad (11.1)$$

Cuando se tienen varias corrientes circulando sobre diferentes espiras cada una de ellas producirá un campo magnético con su momento dipolar magnético asociado. El campo magnético total será la suma vectorial de los campos individuales.



**Figura 11.1:** La corriente eléctrica  $I$  sobre la espira genera un campo magnético semejante al del imán.

Los fenómenos magnéticos producidos por los movimientos orbitales de los electrones alrededor de las moléculas se pueden describir aproximadamente en términos de este modelo de espira de la física clásica asociando a cada orbital una corriente que circula alrededor de una espira con momento dipolar magnético de la forma indicada por la ecuación (11.1). No obstante, es bien sabido que, independientemente de que un electrón esté o no esté en movimiento dentro de algún orbital, él mismo se comporta como un pequeño imán con un momento dipolar magnético cuyo origen ya no puede atribuirse a una corriente circulante como en el modelo descrito arriba. Esto significa que los electrones tienen un momento dipolar magnético intrínseco (por brevedad le llamaremos simplemente momento magnético).

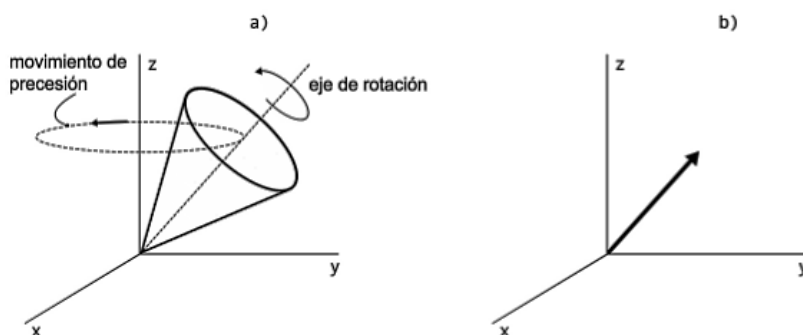
A pesar del comentario anterior, para un estudio simplificado del magnetismo se puede suponer que el momento magnético intrínseco del electrón se debe a que éste está girando y que al hacerlo su carga produce una corriente circulante que da lugar al momento magnético observado. Esta simplificación está justificada porque muchos aspectos cualitativos se pue-

den entender mediante este modelo de la física clásica. En este esquema simplificado es útil representar pictóricamente al electrón como un pequeño trompo cargado eléctricamente girando alrededor de algún eje como se muestra en la figura 11.2a y a su momento magnético mediante una pequeña flecha como en la figura 11.2b. A este giro hipotético que realiza el electrón para generar su momento magnético se le llama *espín*, o bien momento angular intrínseco y se representa mediante una flecha paralela al momento magnético. Así, la flecha de la figura 11.2b representa indistintamente al momento magnético o al espín. No obstante, esta analogía debe tomarse con precaución y en estudios más rigurosos debe desecharse por completo ya que da lugar a varias inconsistencias. Una de ellas es que para que el momento magnético del electrón tuviera su origen en este tipo de rotación se requeriría que el electrón girara a una velocidad mayor que la de la luz. Además los físicos Hendrika J. van Leeuwen y Niels Bohr, uno de los físicos más notables de la historia y uno de los creadores de la mecánica cuántica, demostraron en sus respectivas tesis doctorales que si las leyes de la física clásica fueran correctas sería imposible que existieran cuerpos macroscópicos (imanes) con las propiedades magnéticas que se observan.

Uno de los fenómenos que más causa admiración cuando uno observa un trompo girando es su movimiento de precesión. Éste consiste en un giro adicional que efectúa el trompo alrededor del eje vertical cuando el trompo no está perfectamente vertical, que es la dirección del campo gravitacional (ver figura 11.2a). Este tipo de movimiento de precesión también ocurre en los espines cuando están en presencia de un campo magnético externo el cual produce un efecto análogo al del campo gravitacional en el caso del trompo. Este movimiento es de importancia fundamental en la espintrónica.

Las propiedades magnéticas de los materiales son por supuesto una consecuencia de las propiedades magnéticas de las moléculas que lo forman y de la distribución y orientación de sus orbitales. Pero las propiedades macroscópicas observables se deben casi únicamente al movimiento orbital de los electrones y a sus espines, jugando un papel secundario los momentos magnéticos de los núcleos (éstos son del orden de mil veces menores). Las distintas sustancias tienen distintas propiedades magnéticas debido a sus distintas configuraciones orbitales y al número de electrones en cada orbital. Los materiales que presentan propiedades magnéticas se pueden clasificar a grosso modo en 5 tipos.

- 1) El primero de ellos está formado por materiales cuyos átomos o iones no tienen momentos dipolares magnéticos permanentes. Se les llama



**Figura 11.2:** En la figura de la izquierda se muestra un trompo cuyo eje no está en posición vertical. Cuando se hace girar al trompo rápidamente alrededor de su eje se observa que dicho eje realiza un movimiento llamado precesión que consiste en un giro más lento alrededor del eje vertical. A la derecha se muestra una representación simplificada del trompo mediante una simple flecha.

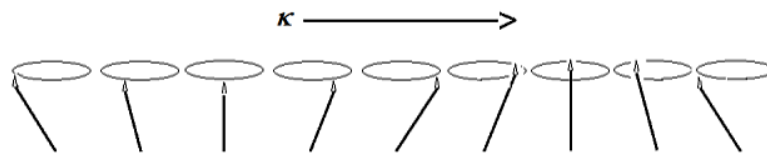
*diamagnetos.*

Los otros cuatro tipos están formados por materiales cuyos átomos o iones si tienen momentos dipolares magnéticos permanentes y, dependiendo de los detalles, se clasifican como sigue.

- 2) Cuando dichos momentos están ordenados al azar. Se les llama *paramagnetos*.
- 3) Cuando todos los momentos dipolares magnéticos son de la misma intensidad y están orientados en la misma dirección. Se les llama *ferromagnetos*.
- 4) Cuando todos los momentos son de la misma intensidad pero están orientados alternadamente en direcciones opuestas. Se les llama *antiferromagnetos*.
- 5) Cuando el material tiene una estructura semejante a la de los antiferromagnetos pero de manera que los momentos que apuntan en una dirección son más pequeños que los que apuntan en la otra. En este caso el efecto neto es parecido al de los ferromagnetos. Se les llama *ferrimagnetos*.

En realidad existen configuraciones mucho más complicadas que las listadas arriba pero para nuestros fines nos restringiremos sólo a ellas. Es claro que en los tres últimos tipos debe existir un orden de largo alcances que

no existe en los dos primeros tipos. A temperaturas diferentes de cero las fluctuaciones térmicas evitan un alineamiento perfecto de los momentos magnéticos y cuando la temperatura es suficientemente alta el orden es totalmente destruido. En este caso los ferromagnetos, los ferrimagnetos y los antiferromagnetos se comportan como un paramagneto, es decir con sus momentos magnéticos orientados al azar. Cuando a un ferromagneto o un ferrimagneto se le aplica un campo magnético externo suficientemente intenso, todos los momentos magnéticos se alinean en la dirección del campo aplicado y se dice entonces que el material está saturado magnéticamente. No obstante, existen pequeñas desviaciones dependientes del tiempo de la dirección de los momentos magnéticos y usualmente son descritas en términos de la precesión de los espines. Estas perturbaciones al estado de saturación magnética son de gran interés teórico y tienen muchas aplicaciones, su estudio está en el terreno de lo que hoy se conoce como espintrónica.



**Figura 11.3:** Representación de la propagación de una onda de espín. Cada espín realiza un movimiento de precesión pero está desfasado respecto al de sus vecinos. Conforme va transcurriendo el tiempo esta configuración se va desplazando hacia la derecha en la dirección del vector  $k$ .

En particular, uno de los subtemas que estudia la espintrónica es el de los fenómenos ondulatorios. Estos fenómenos están presentes en un sinnúmero de sistemas físicos y, por supuesto, los materiales magnéticos no son la excepción. En algunos de estos materiales los espines de los electrones externos de las moléculas son capaces de efectuar movimientos ondulatorios colectivos sincronizados que dan lugar lo que se llama *ondas de espín*. Éstas se originan al aplicar en una zona del material una perturbación magnética que detone un movimiento secuencial en los espines circundantes, que se propaga a lo largo del material en el estado de saturación magnética descrito arriba. La figura 11.3 es una imagen simplificada de una onda de espín. En la figura se muestra una cadena unidimensional de espines en donde cada espín realiza un movimiento de precesión desfasado con respecto al de sus vecinos. En un cierto instante la configuración de los espines se ve como la mostrada en la figura pero a tiempos posteriores esa configuración se ve

desplazada hacia la derecha en la dirección del vector  $\mathbf{k}$ . Se dice que una onda es monocromática cuando está caracterizada por una sola frecuencia  $\omega$  y un solo vector  $\mathbf{k}$  que indica la dirección de propagación de la onda. La longitud de una oscilación completa, llamada longitud de onda, es igual a  $2\pi/|\mathbf{k}|$ , siendo  $|\mathbf{k}|$  la magnitud de  $\mathbf{k}$  y se le llama número de onda. Uno de los intereses fundamentales de la espintrónica es determinar la forma de la dependencia de la frecuencia  $\omega$  sobre el número de ondas  $|\mathbf{k}|$ . A la expresión matemática que indica esa dependencia se le llama relación de dispersión.

Así como las ondas electromagnéticas presentan un comportamiento dual de tal forma que en el marco de la física cuántica son paquetes de corpúsculos llamados fotones, las ondas de espín también presentan un comportamiento dual. En este marco las ondas de espín son paquetes de corpúsculos llamados *magnones*, es decir, los cuantos de ondas de espín son los magnones, los cuales son cuasipartículas bosónicas. Éstos tienen una energía igual a  $\hbar\omega$ , un momento lineal igual a  $\hbar\mathbf{k}$  y una magnitud de su espín igual a  $\hbar$ , siendo  $\hbar$  la constante de Planck. A la espintrónica enfocada a las propiedades corpusculares de las ondas de espín se le llama *espintrónica magnónica* y uno de sus temas principales es la interacción entre los dos tipos de corrientes de espín que pueden ocurrir en los materiales magnéticos: las corrientes de espín transportadas por los electrones y las corrientes magnónicas, que son flujos de espín que no involucran traslación de electrones. Además, la espintrónica sólo se enfoca al estudio de los magnones excitados externamente, dejando de lado a los magnones térmicos que están presentes en todos los materiales ordenados magnéticamente cuando están a temperaturas diferentes de cero.

Entre los materiales más idóneos para la espintrónica y la propagación de las ondas de espín están los granates magnéticos y los ferrimagnetos, principalmente las ferritas y el cristal de itrio, hierro y granate  $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$  que simbólicamente se denota como YIG. Una de las ventajas de este material es que las ondas de espín pueden viajar distancias mucho más largas (del orden de centímetros) que en otros materiales. Otro de los materiales idóneos es el permaloyd (Py) que es una aleación de níquel y hierro  $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$ , donde los valores típicos de  $x$  están entre 0.18 y 0.25. Este material tiene la ventaja de que es fácil de fabricar.

En general la relación de dispersión depende fuertemente de la forma del material y del ángulo que hay entre la dirección de propagación de la onda y la dirección del campo magnético que se usa para saturar al material. En lo que sigue, nos restringiremos a discutir sólo los materiales que tienen la forma de una cinta delgada, los cuales se comportan como guías de onda

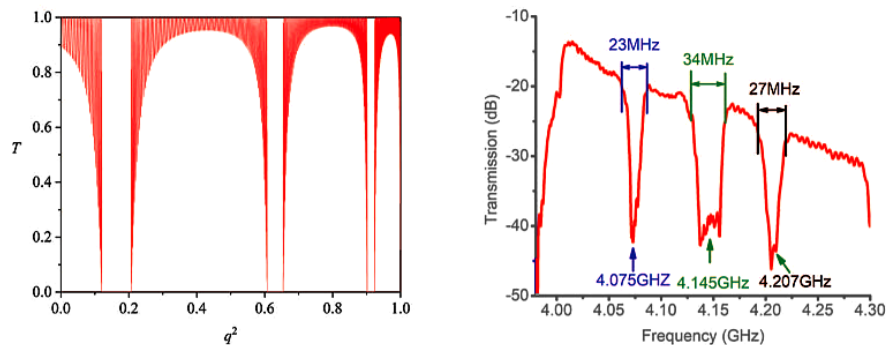


para las ondas de espín. En ellos pueden existir principalmente tres tipos de ondas de espín:

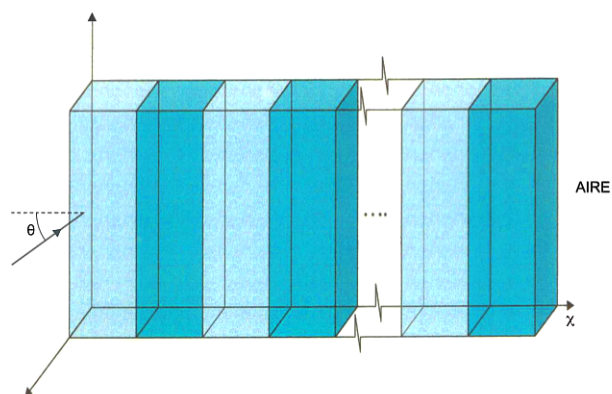
- 1) Ondas de espín volumétricas progresivas.
- 2) Ondas de espín volumétricas regresivas.
- 3) Ondas de espín superficiales.

La orientación relativa entre el eje de la guía, la dirección de propagación y la dirección del campo magnético determina cuál de estas ondas puede excitarse dentro de la guía.

Con estas guías de onda fabricadas a base de cristales de YIG se han construido algunos *metamateriales*. Éstos son sistemas que no existen de manera natural en el planeta pero que el hombre los ha creado utilizando componentes que sí existen de manera natural. Un tipo de metamateriales son los cristales artificiales cuya característica principal es que tienen una estructura periódica en alguna de sus propiedades. En particular, si se construye un sistema con propiedades magnéticas periódicas se obtiene lo que se llama un *cristal magnónico*. Estos cristales pueden tener un periodo cientos de miles de veces mayor que el periodo de los cristales de YIG con los que están contruidos.



**Figura 11.4:** La gráfica de la izquierda muestra la intensidad de la luz transmitida a través del filtro óptico de la figura 11.5 como función de  $q^2 = \cos^2 \theta$ , siendo  $\theta$  el ángulo de incidencia de la luz. La gráfica de la derecha muestra la intensidad de la energía transmitida por una onda de espín a través de un cristal magnónico como función de la frecuencia. La presencia de bandas de transmisión en ambas figuras es evidente.



**Figura 11.5:** Filtro óptico que consiste en una secuencia periódica de capas semi-transparentes. La luz que incide sobre la cara izquierda del filtro formando un ángulo  $\theta$  se transmite parcialmente a través de las capas y sale por el lado derecho. La primera gráfica de la figura 11.4 indica la intensidad de la luz que sale.

En los cristales magnónicos se han observado fenómenos análogos a los que ocurren en otros campos, ya sea dentro de la física clásica o dentro de la física cuántica. Entre ellos podemos mencionar el fenómeno de localización y la estructura de bandas que se definirá a continuación. La gráfica de la izquierda de la figura 11.4 indica la intensidad de la luz transmitida a través de un filtro óptico cuando se le ilumina con luz que incide sobre una de sus caras formando un ángulo  $\theta$  con dicha cara. El filtro consiste en una secuencia periódica de capas como la mostrada en la figura 11.5. En la gráfica se ve que para ciertos valores de  $q^2 = \cos^2 \theta$ , la intensidad de la luz transmitida es máxima (por comodidad el valor máximo se fijó en 1) y que para otros valores de  $q^2$  es cero. Esto significa que la transmisión de luz sólo ocurre en ciertos intervalos de valores de  $q^2$  llamados bandas. Esta gráfica tiene características análogas a las de la gráfica de la derecha. Esta última indica la intensidad de la energía transmitida (medida en decibeles) por una onda de espín cuando viaja a través de un cristal magnónico de YIG. Nuevamente se observa una estructura de bandas pero ahora sobre la frecuencia (que es la variable sobre el eje horizontal).

La primera gráfica es un resultado teórico y la segunda es un resultado experimental, pero en ambos casos existe la contraparte. Por brevedad sólo se muestra una de cada una. Como se mencionó anteriormente, las estructura de bandas se presenta en un sinnúmero de sistemas periódicos, independientemente de que estén gobernados por las leyes de la física clásica

o de la cuántica. Las gráficas de la figura 11.4 son sólo dos ejemplos, entre muchos otros, de estructura de bandas de los sistemas periódicos. En este sentido, los cristales magnónicos son análogos a los cristales semiconductores, los cristales fonónicos, los cristales fotónicos, los cristales piezoeléctricos, los cuerpos elásticos con estructura periódica, etc. Sin embargo, usualmente las analogías no son perfectas y pueden aparecer algunas diferencias. Por ejemplo, en los semiconductores el número de bandas es infinito, en cambio el número de bandas en los cristales magnónicos es finito. Además, como el periodo de éstos es muy grande comparado con el de los cristales semiconductores, es posible observar directamente fenómenos que son muy difíciles de observar directamente en los cristales semiconductores. Un ejemplo de esto son las escaleras de Wannier que se discutirán a continuación y que constituyen un caso más de analogías existentes entre los diferentes campos de la física.

Actualmente se está estudiando el comportamiento de las ondas de espín en cristales magnónicos que se han modificado añadiendo una variación lineal en sus propiedades magnéticas. A estos sistemas los hemos llamado *cristales magnónicos gradados* y la teoría predice que en ellos deben aparecer resonancias en forma de escaleras de Wannier. Estas resonancias tienen la característica de que la distancia entre cada par de resonancias contiguas es siempre la misma. Esto es semejante a lo que ocurre en una escalera común en donde la distancia vertical entre escalones contiguos es la misma para todos. Este tipo de resonancias fueron descubiertas por Wannier en 1962 al estudiar teóricamente la propagación de electrones a través de cristales sujetos a un campo eléctrico externo. Sin embargo, por dificultades técnicas su observación experimental no se pudo hacer sino hasta 20 años después. Esperamos que para el caso de los cristales magnónicos gradados el tiempo que transcurra entre su predicción teórica y su observación experimental sea mucho menor. Actualmente se está trabajando en ello. La importancia de estas resonancias en la física de los semiconductores es que destruyen por completo la estructura de bandas modificando drásticamente el comportamiento del material. Es de esperarse que en el caso de los cristales magnónicos gradados ocurra algo análogo.

PARA SABER MÁS:

- M.D. Patil, J.S. Pingale, and U.I. Masumdar, *Overview of Spintronics*, International Journal of Engineering Research & Technology, Vol. 2, Pags. 27-32 (2013).

- S.A. Wolf, D.D. Awschalom, R.A. Buhrman, J.M. Daughton, S. von Molnár, M.L. Roukes, A.Y. Chtchelkanova, and D.M. Treger, *Spintronics: Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future*, Science, Vol. 294, Pags. 1488-1495 (2001).
- J.A. Otero, G. Monsivais, M.T. Pérez-Maldonado, E.M. Hernández and F. Delgado, *Energy Localization in Optial Systems Showing Electromagnetic Wannier Ladders Resonances*, Supperlattices and Microstructures, 108 799-807 (2016).
- C.L. Ordóñez-Romero, Z. Lazcano-Ortiz, A. Drozdovskii, B. Kalinikos, M. Aguilar-Huerta, J.L. Domínguez-Juárez, G. López-Maldonado, N. Qureshi, O. Kolokoltsev, and G. Monsivais, *Mapping of Spin Wave Propagation in a One-Dimensional Magnonic Crystal*, Jour. App. Phys. 120, 043901 (2016).

## SOLITONES: LAS ONDAS QUE SE COMPORTAN COMO PARTÍCULAS

*Karen Volke\**

**Las ondas solitarias o solitones, como muchos otros fenómenos ondulatorios, aparecen en distintas escalas y entornos, desde ondas superficiales en el océano hasta condensados de Bose-Einstein. Existen solitones en el dominio temporal y en el dominio espacial, en el contexto de la física clásica y de la física cuántica. El término solitón se refiere a paquetes de ondas altamente localizados que evolucionan sin sufrir distorsión, gracias a una compensación entre efectos lineales y no lineales. Esta característica y la manera en que los solitones interactúan entre sí, evoca el comportamiento de una partícula clásica.**

Un haz de luz, las olas en el mar, un sismo o cualquier tipo de sonido son algunos ejemplos de ondas clásicas, y nuestra primera aproximación a su estudio es siempre como fenómenos lineales. Una de las propiedades de los sistemas lineales es que satisfacen el principio de superposición. Esto nos permite describir cualquier paquete de ondas, ya sea en el dominio temporal o espacial, mediante una suma de ondas planas sobre un continuo de frecuencias o de vectores de onda (frecuencias espaciales), respectivamente, cuya amplitud está dada por la transformada de Fourier (TF) del paquete. Cuando el paquete de ondas es altamente localizado, su evolución en el tiempo y/o en el espacio exhibirá efectos asociados con su extensión finita. En el dominio temporal, el fenómeno físico responsable del ensanchamiento de un pulso es lo que llamamos dispersión<sup>1</sup>, mientras que en el dominio espacial, un paquete de ondas se va expandiendo debido a la difracción.

---

\*Departamento de Física Cuántica y Fotónica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

<sup>1</sup>Aquí, dispersión se refiere a la traducción de la palabra en inglés: *dispersion*, fenómeno que establece la dependencia de la velocidad de una onda con respecto a la frecuencia. No debe confundirse con la acepción de dispersión utilizada comúnmente en mecánica cuántica (ver por ejemplo [Capítulo 24](#)), que es traducción de la palabra *scattering*.

Sin embargo, la Naturaleza es predominantemente no lineal. Es decir, los sistemas físicos lineales, pese a que en muchos casos representan una excelente aproximación de la realidad, son más bien una excepción que una regla. Cuando entran en juego efectos no lineales surgen una gran cantidad de nuevos fenómenos. Para que el carácter no lineal de un sistema se manifieste, es necesario que la amplitud del estímulo sea “suficientemente grande”<sup>2</sup>. Aquí discutiremos lo que ocurre con un paquete de ondas altamente localizado en presencia de efectos no lineales, otros ejemplos de efectos no lineales se discuten en el [Capítulo 33](#).

#### EL DESCUBRIMIENTO DE LAS ‘ONDAS DE TRASLACIÓN’

La historia de lo que hoy conocemos como solitones comienza en 1834, cuando el ingeniero y arquitecto naval de origen escocés John Scott Russell descubrió por serendipia un fenómeno notable. Un bote arrastrado desde las orillas por un par de caballos en un canal angosto fue detenido bruscamente, lo cual produjo una gran perturbación en la superficie del agua que empezó a viajar a lo largo del canal en forma de una cresta única, sin cambiar su amplitud, su forma, ni su velocidad. Al darse cuenta de lo extraordinario de este fenómeno, Russell siguió la onda desde su caballo por más de dos kilómetros.

Científicos de la talla de Airy y Stokes dudaron de la posibilidad de generar este tipo de *onda de traslación*, como le llamó Russell, que se propagara sin distorsión, ya que la teoría desarrollada hasta entonces indicaba que tal perturbación sería inestable. Fue hasta 1871 que el francés Joseph Boussinesq incorporó a la teoría efectos no lineales que permitirían explicar la onda solitaria. Poco después, Lord Rayleigh publicó un artículo en el que también apoyaba la observación de Russell, reconociendo el trabajo de Boussinesq. Finalmente, en 1895 el holandés Diederik Korteweg y su estudiante doctoral Gustav de Vries formularon el modelo que prevalece para describir la propagación de ondas confinadas en aguas someras, hoy en día conocido como la ecuación KdV (Korteweg-de Vries).

La forma canónica de la ecuación KdV es<sup>3</sup>

$$\partial_t u + 6u\partial_x u + \partial_x^3 u = 0, \quad (12.1)$$

---

<sup>2</sup>Lo que se considere grande depende mucho de cada sistema físico. Más adelante se darán algunos ejemplos.

<sup>3</sup>Esta es una reparametrización de la ecuación original, la cual describía la elevación de la altura del agua en el canal. La forma canónica es adimensional, al igual que las variables involucradas.

donde se ha usado la notación  $u = u(x, t)$ ;  $\partial_q = \frac{\partial}{\partial q}$ ;  $\partial_q^n = \frac{\partial^n}{\partial q^n}$ . Esta ecuación tiene un término dispersivo y un término no lineal. Si omitimos el término no lineal se obtiene la ecuación:  $\partial_t u + \partial_x^3 u = 0$ , cuya solución se puede expresar como una superposición de ondas armónicas de la forma  $A(\omega) \exp[i(kx + \omega t)]$ , donde  $A(\omega)$ ,  $k = 2\pi/\lambda$ ,  $\omega$  y  $\lambda$  son la amplitud, el número de onda, la frecuencia y la longitud de onda de cada componente, respectivamente. Para que dicha superposición sea una solución, una sustitución directa conduce a que se debe cumplir la *relación de dispersión*:  $\omega(k) = k^3$ . La velocidad de fase de esta onda es  $v_f = \omega/k = k^2$ , mientras que la velocidad de grupo está dada por  $v_g = d\omega/dk = 3k^2$ . Al propagarse la onda se deformará, puesto que las componentes con mayor  $k$  viajarán más rápido.

Si ahora se omite el término dispersivo se obtiene:  $\partial_t u + 6u\partial_x u = 0$ . Es muy simple ver que una solución general de esta ecuación es de la forma  $u(x, t) = f(x - 6ut)$ , donde  $f$  es una función arbitraria. Esto representa una perturbación que viaja a una velocidad directamente proporcional a su propia amplitud. Un ejemplo son las olas en el mar; la cresta viajará más rápido que las porciones de la ola que tienen menor amplitud, de modo que eventualmente las rebasará y es entonces cuando la ola rompe.

Por último, consideremos la ecuación (12.1) completa. Aquí nos interesa una solución en particular, que es exactamente integrable. Si se define la variable  $\tau = x - vt$ , tal que  $u = u(\tau)$ , la ecuación (12.1) se puede reescribir como una ecuación diferencial ordinaria con respecto a  $\tau$ . Después de un par de integraciones sucesivas se obtiene

$$\frac{1}{2} \left( \frac{du}{d\tau} \right)^2 + V(u) = c_2, \quad (12.2)$$

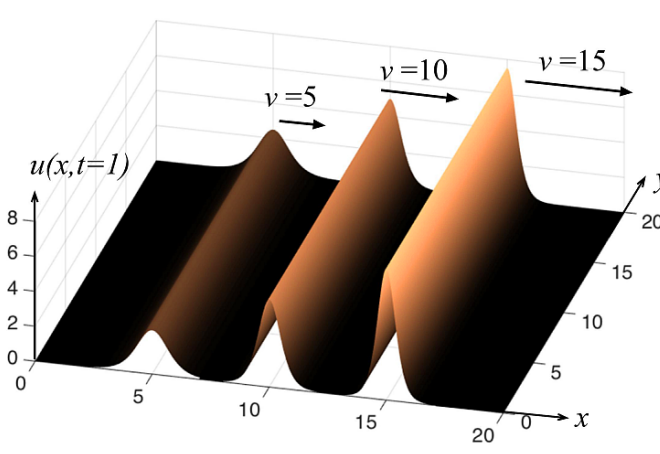
donde  $V(u) = (u^3 - \frac{v}{2}u^2 - c_1u)$ , siendo  $c_1$  y  $c_2$  constantes de integración. Esto claramente recuerda a la ecuación de conservación de energía para una partícula en presencia de un potencial  $V(u)$ . En particular, tomando  $c_1 = c_2 = 0$ , la solución de la ecuación (12.2) es<sup>4</sup>

$$u(\tau) = \frac{v}{2} \operatorname{sech}^2 \left[ \frac{\sqrt{v}}{2} (x - vt) \right]. \quad (12.3)$$

Esto representa una familia de soluciones asociada al parámetro  $v$ , que denota la rapidez con la que esta onda viaja *sin sufrir distorsión*. Esto ocurre

<sup>4</sup>Esta selección de las constantes  $c_1$  y  $c_2$  se obtiene al imponer que la onda tenga un tamaño finito, es decir, que cuando  $x \rightarrow \pm\infty$ , se cumpla que  $u \rightarrow 0$ ,  $d_\tau u \rightarrow 0$  y  $d_\tau^2 u \rightarrow 0$ . Sin embargo, se pueden encontrar otras soluciones para valores diferentes de  $c_1$  y  $c_2$ , representadas en términos de integrales elípticas.

porque los efectos no lineales se compensan exactamente con los dispersivos. Nótese además, que la amplitud de la onda es proporcional a  $v/2$  y su ancho es inversamente proporcional a  $\sqrt{v}$ . Es decir, mientras mayor es la amplitud, la onda viaja más rápido y su ancho es menor, como los ejemplos que se ilustran en la figura 12.1.



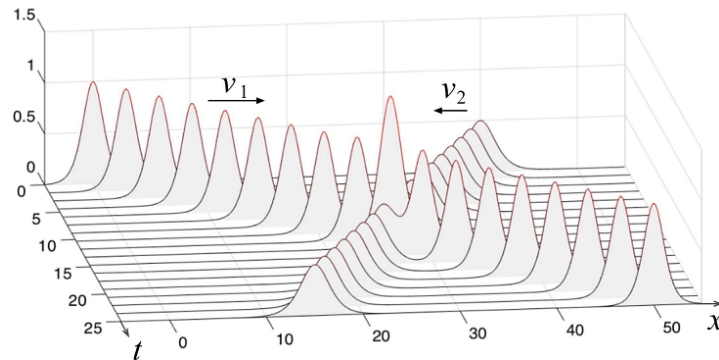
**Figura 12.1:** Tres ondas solitarias viajando a lo largo de la dirección  $x$  con distintos valores del parámetro  $v$ . Si los tres solitones hubieran partido del mismo punto en el instante  $t = 0$ , la imagen ilustra sus posiciones relativas cuando  $t = 1$ .

El tema de la onda solitaria fue retomado hasta 1965, en una investigación numérica sobre la ecuación KdV realizada por Norman Zabusky y Martin Kruskal. Ellos mostraron que después de interactuar, dos o más perturbaciones de este tipo conservan su identidad (ver figura 12.2), como si se tratara de una colisión elástica entre partículas, por lo que acuñaron el término *solitón*.

La vía por la que Zabusky y Kruskal llegaron a este problema fue muy diferente al estudio de las ondas superficiales en un canal; estaban buscando entender una paradoja planteada más de una década antes por Fermi, Pasta, Ulam y Tsingou, conocido hoy como el problema FPTU. A saber, cuando estos científicos se propusieron calcular el flujo de energía en una red periódica de masas iguales conectadas por resortes no lineales (que pretendía modelar la interacción entre fonones en una red atómica), esperaban encontrar que la energía contenida inicialmente en el modo de oscilación fundamental sería eventualmente transferida a los armónicos superiores debido a la no linealidad, hasta alcanzar la termalización. En lugar de esto, encontraron que el sistema distribuía la energía entre algunos modos de ba-



jo orden y después de un periodo largo presentaba recurrencias del estado inicial (ver [Capítulo 2](#)).



**Figura 12.2:** Colisión entre dos solitones.

Buscando una aproximación continua al sistema de Fermi y colaboradores, Zabusky y Kruskal llegaron a la ecuación KdV con condiciones a la frontera periódicas (lo que representaría un anillo de resortes no lineales acoplados). ¿Y cómo se conecta esto con los solitones? Pues mostraron que una excitación inicial de longitud de onda larga se “rompe” en un conjunto de solitones que se propagan en el sistema con diferentes velocidades, y que después de múltiples colisiones, coinciden de nuevo para reproducir aproximadamente la condición inicial<sup>5</sup>. Esto detonó un gran interés en el tema, que se convirtió desde entonces en uno de los tópicos más atractivos en las matemáticas aplicadas, al igual que en muchas áreas de la física e incluso en otras disciplinas. Por ejemplo, se han encontrado comportamientos de solitón en sistemas que van desde ondas en plasmas, flujo de calor en sólidos, cadenas magnéticas y ondas de espín, ondas de superficie en aguas profundas, ondas acústicas e incluso se han usado modelos basados en solitones para explicar el transporte de energía en proteínas y reacciones químicas no lineales en presencia de difusión. Hoy en día, los llamados *solitones topológicos* constituyen un tema importante de investigación en las áreas de gravitación y altas energías, así como en algunos sistemas de materia condensada, pero su discusión está fuera del alcance de este escrito.

Más aún, el atractivo de estas ondas con personalidad de partículas aumenta ante el hecho de que se pueden generar de manera controlada en

<sup>5</sup>Cabe mencionar que hay formas alternativas de abordar e interpretar el problema FPUT, como se describe en el [Capítulo 2](#).

un laboratorio, aunque también surgen de manera espontánea en algunos fenómenos naturales.

#### SOLITONES EN EL LABORATORIO

Uno de los terrenos más fértiles para el estudio experimental de solitones y su potencial de aplicación tecnológica ha sido la óptica. De hecho, en óptica se distinguen dos clases de solitones: los temporales y los espaciales. Los primeros se pueden identificar como un análogo más cercano a la onda de traslación de Russell, en el sentido de que existe un confinamiento espacial (como el del canal) y la variable de evolución es el tiempo. Por ejemplo, un pulso de luz propagándose a lo largo de una fibra óptica, bajo las condiciones apropiadas, se puede tornar en un solitón óptico temporal. En la jerga de los especialistas se dice que se trata de solitones en  $(1 + 1)D$  o unidimensionales, haciendo referencia a que se describen en una dimensión espacial y el tiempo.

En cambio, los solitones espaciales pueden ser unidimensionales o bidimensionales; éstos últimos se denotan como  $(2 + 1)D$ . Pero en este caso, la variable de evolución es una coordenada espacial que representa la dirección de propagación, mientras que las otras dos coordenadas describen el perfil transversal de intensidad. El tener una mayor dimensionalidad aporta nuevas posibilidades, especialmente en el caso de interacción entre solitones [1].

Adicionalmente, los solitones también se pueden clasificar en brillantes y oscuros. Así, se puede tener un solitón temporal brillante u oscuro, y los solitones espaciales también pueden ser brillantes u oscuros, en  $(1 + 1)D$  o en  $(2 + 1)D$ . Enfocaremos la discusión que sigue en los solitones ópticos espaciales, que por el momento parecen más enigmáticos.

Un paquete de ondas localizado espacialmente es lo que en óptica se conoce como un haz de luz, es decir, un modo que se propaga de manera estable a lo largo de una dirección preferencial. Matemáticamente, se puede expresar como  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{e}_p U(\mathbf{r}) \exp(-i\omega_0 t)$ , donde el vector  $\mathbf{e}_p$  representa el estado de polarización y  $U(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) \exp(ikz)$ , siendo  $z$  la coordenada de propagación. Aquí se ha asumido que el campo óptico es monocromático, de frecuencia  $\omega_0$ , y  $k = n_0 \omega_0 / c$ , donde  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío y  $n_0 = n_0(\omega_0)$  es el índice de refracción del medio evaluado en la frecuencia  $\omega_0$  y en ausencia de cualquier efecto no lineal. La expresión para  $U(\mathbf{r})$  es muy parecida a una onda plana, excepto porque su amplitud  $u(\mathbf{r})$  tiene una extensión transversal finita, lo cual implica que debe ser afectado

por la difracción. En efecto, un haz de luz en general se va expandiendo conforme se propaga (esto lo podemos verificar incluso con un apuntador láser, cuya sección transversal aumenta mientras más lejano esté el plano de proyección).

Por otra parte, es a través de la relación que existe entre el campo eléctrico de la luz y el vector de polarización eléctrica donde se define si un medio es lineal o no. Cuando el medio presenta una respuesta no lineal, la polarización eléctrica se puede expresar como<sup>6</sup>  $\mathbf{P}(\mathbf{E}) = \epsilon_0 \chi \mathbf{E} + \mathbf{P}_{NL}(\mathbf{E})$ , donde  $\mathbf{P}_{NL}$  es una función no lineal de  $\mathbf{E}$ . Si la no linealidad de un medio es débil, siempre es posible expresarla en términos de una serie de potencias, por lo que se habla de óptica no lineal de segundo y de tercer orden (los términos de potencias superiores suelen ser despreciables). En particular, si  $\mathbf{P}_{NL}$  es una función de tercer orden, una de las consecuencias es que el índice de refracción del medio es función de la intensidad  $n = n(I)$ .

La ecuación que describe a un haz de luz en este tipo de medio se puede expresar como

$$\nabla_{\perp}^2 u + f(I)u = -2ik\partial_z u, \quad (12.4)$$

donde  $\nabla_{\perp}^2$  es el laplaciano transversal y  $f(I) = k_0^2 (n^2(I) - n_0^2)$ . Para un haz de luz monocromático, la intensidad es  $I(\mathbf{r}) = |u|^2/2\eta$ , siendo  $\eta$  la impedancia electromagnética, por lo que la ecuación (12.4) es claramente no lineal.

En el caso más simple  $n(I) = n_0 + n_2 I$ , lo que se conoce como efecto Kerr óptico, por lo cual los medios para los que se satisface esta relación son llamados medios Kerr. La magnitud del coeficiente  $n_2$  depende del material, y puede ser sensible a la frecuencia y al estado de polarización, pero suele tener un valor bastante pequeño, lo que implica que para observar efectos no lineales se requiere una intensidad alta. Es por eso que la óptica no lineal se empezó a desarrollar a partir de la invención del láser. Como referencia, los valores típicos de  $n_2$  en  $\text{cm}^2/\text{W}$  son del orden de  $10^{-16}$  a  $10^{-14}$  para vidrios, donde se realizaron algunos de los primeros experimentos de solitones espaciales en los años 90. Sin embargo, hoy se cuenta con materiales orgánicos y semiconductores, por ejemplo, cuyos rangos de valores de  $n_2$  (en  $\text{cm}^2/\text{W}$ ) están entre  $10^{-10}$  y  $10^{-8}$  para los primeros y de  $10^{-10}$  a  $10^{-2}$  para los segundos [3].

---

<sup>6</sup>Recordemos que cuando el medio es anisotrópico, la susceptibilidad eléctrica  $\chi$  es un tensor, y esto ocurre en muchos de los medios no lineales más comunes, que son cristalinos. Aquí consideraremos un medio isotrópico; el tratamiento completo se puede encontrar en cualquier libro de texto de óptica no lineal, por ejemplo [2].

Si  $n_2 I \ll n_0$ , se puede aproximar  $f(I) \approx 2n_0 n_2 I$ , y tomando el caso (1+1)D, la ecuación (12.4) se reduce a

$$\alpha \partial_x^2 u + \beta |u|^2 u = -2i\gamma \partial_z u, \quad (12.5)$$

donde  $\alpha = 1$ ,  $\beta = (n_2/\eta_0)k^2$ , con  $\eta_0$  la impedancia electromagnética del vacío, y  $\gamma = k$ . Ésta es la ecuación no lineal de Schrödinger, denotada usualmente como ecuación NLS, que tiene como solución analítica:  $u(x, z) = A_0 \operatorname{sech}(x/w_0) \exp(-i\lambda z/4\pi w_0^2)$ . Por lo tanto, la distribución de intensidad de esta onda se puede expresar como

$$I(x, z) = \frac{A_0^2}{2\eta} \operatorname{sech}^2\left(\frac{x}{w_0}\right). \quad (12.6)$$

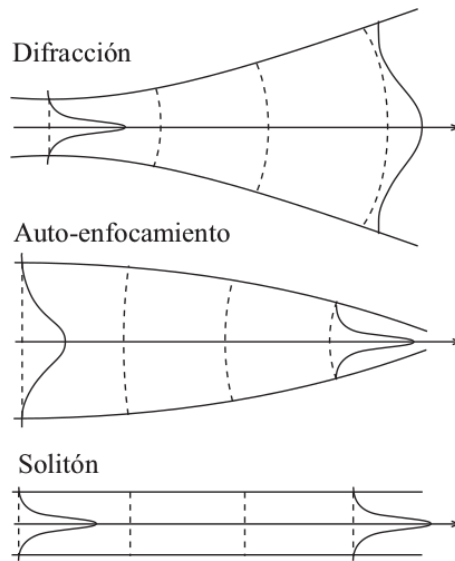
Aquí, las constantes  $A_0$  y  $w_0$  representan la amplitud inicial de la onda y el ancho del perfil transversal de intensidad, que se mantienen invariantes a lo largo de su propagación, al igual que el perfil del haz, puesto que no depende de  $z$ ; se trata de un solitón óptico espacial. El hecho de que no haya dependencia en  $y$  significa que lo podemos imaginar como una hoja de luz dentro del material<sup>7</sup>, orientada paralela al plano  $y$ - $z$ .

Físicamente, lo que ocurre es lo siguiente. Cuando  $n_2$  es positivo, el índice de refracción aumenta proporcionalmente a la intensidad de la luz, de modo que si el perfil transversal de intensidad tiene un máximo en el centro, se generará un efecto de *auto-enfocamiento*, puesto que la porción central de la onda viajará más lentamente que las orillas, lo que curvará el frente de onda tornándolo convergente. Bajo las condiciones adecuadas, el auto-enfocamiento compensa exactamente a la difracción, que tendería a ensanchar la sección transversal del haz, y se produce así un solitón espacial. Esto se ilustra en la figura 12.3. Otra manera de interpretarlo es que el haz genera una guía de onda auto-inducida al incrementar el índice de refracción en la región central, y ésta a su vez confina al propio haz a través de ella. Por eso a veces también se dice que los solitones espaciales son haces *auto-atrapados*.

¿Y qué pasa si  $n_2$  es negativo? En ese caso, el efecto que se produce es de *auto-desenfocamiento*, es decir, el medio actúa como una lente divergente ante la presencia de un haz gaussiano. Pero analicemos qué pasa si se introduce en un medio como estos una distribución de intensidad que tenga una sección oscura rodeada por un fondo brillante. Esto se podría generar colocando una pequeña obstrucción en la faceta de entrada al medio no lineal e

<sup>7</sup>En la práctica, se usa una guía para confinar el haz en la dirección  $y$ , mientras que en la dirección  $x$  se auto-atrapa.

iluminándolo con un haz extendido. El patrón de difracción producido por el obstáculo tiende a ensancharse conforme se propaga, como se muestra en el lado derecho de la figura 12.4. El índice de refracción es mayor en la región oscura, por lo que la luz exterior tiende a curvarse hacia el centro del patrón de difracción. Nuevamente, la difracción se compensa con el efecto no-lineal, esta vez para generar un solitón espacial oscuro, cuya expresión matemática es similar a (12.6), reemplazando  $\text{sech} \rightarrow \tanh$ .

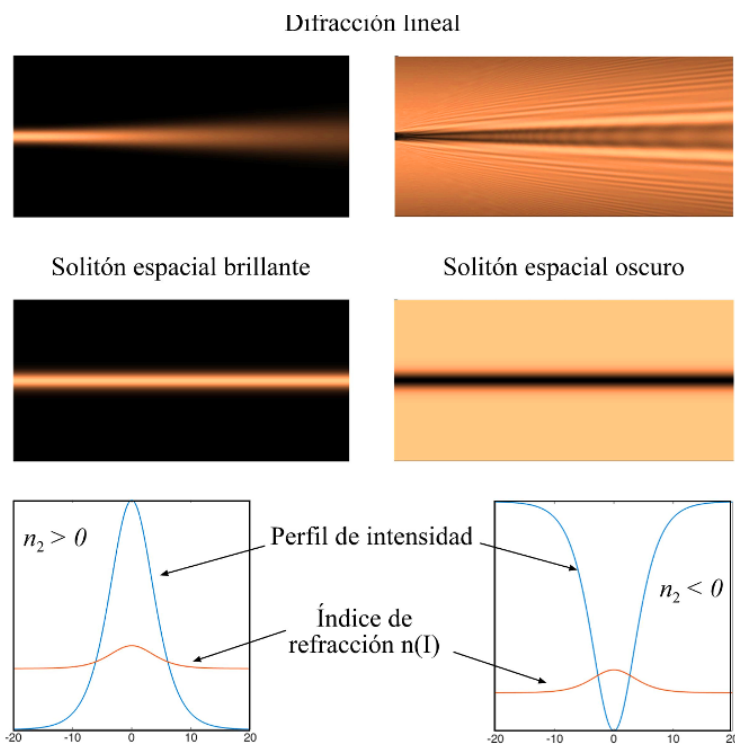


**Figura 12.3:** Cuando la difracción natural de un haz de luz (imagen superior) y el auto-enfocamiento no lineal (imagen central) se compensan exactamente, se forma un solitón óptico espacial (imagen inferior). Las líneas discontinuas representan los frentes de onda.

Los medios Kerr, tanto positivos ( $n_2 > 0$ ) como negativos ( $n_2 < 0$ ), sólo pueden albergar solitones espaciales en  $(1 + 1)D$ . Sin embargo, hay muchos medios con una dependencia más complicada de  $f(I)$  en la ecuación (12.4), que sí pueden producir solitones en  $(2 + 1)D$ , ya sea brillantes u oscuros. Un ejemplo de éstos son los cristales líquidos nemáticos; los solitones espaciales brillantes que se generan dentro de ellos reciben el nombre de nematicones, y toman la forma de algo que podríamos imaginar como una aguja de luz.

Una de las aplicaciones interesantes de los solitones espaciales es que pueden guiar dentro de sí otro haz de luz de menor intensidad, que incluso suele ser de un color diferente. Es decir, se puede controlar luz con luz.

También es muy interesante estudiar las interacciones entre solitones espaciales que, por ejemplo, se pueden atraer hasta fusionarse formando un nuevo solitón, como si se tratara de una colisión inelástica, se pueden repeler manteniendo su identidad, o incluso pueden girar uno en torno al otro formando una especie de trenza [1]. Estas *fuerzas* de atracción o repulsión que ejercen entre sí, reafirma la noción de un comportamiento tipo partícula.



**Figura 12.4:** En la columna del lado izquierdo se ilustra la difracción de un haz gaussiano y la formación de un solitón brillante, mientras que del lado derecho se ilustra la formación de un solitón oscuro.

Retomemos ahora la discusión sobre los solitones ópticos temporales. El balance entre dispersión y no linealidad se puede manifestar de formas muy diferentes entre un sistema y otro. Un pulso de luz es un paquete de ondas en un rango de frecuencias  $2\delta\omega$  alrededor de una frecuencia central  $\omega_0$ , que está caracterizado por una envolvente cuya variación es lenta en comparación con  $\omega_0$ . Lo que afecta la forma de la envolvente es la dispersión en la velocidad de grupo:  $dv_g/dk = d^2\omega/dk^2$ . Si  $dv_g/dk < 0$ , las

componentes con menor frecuencia se retrasan con respecto a las de mayor frecuencia, por lo que la parte inicial del pulso sufre un corrimiento de frecuencias hacia el azul y su parte final hacia el rojo. El resultado es que el pulso se ensancha.

Por otra parte, una no linealidad óptica de tercer orden provoca en un pulso un fenómeno conocido como *auto-modulación de fase* [2]. Para entender esto, en primer lugar notemos que al tratar con campos ópticos que varían en el tiempo se puede definir una intensidad *instantánea*,  $I(z, t)$ . Conforme la luz se propaga dentro del medio provoca un cambio en el índice de refracción que depende del tiempo. Consideremos por ejemplo un pulso con envolvente gaussiana  $I(0, t) = |A_0|^2 \exp[-(2t^2/\tau_0^2)]$ , con  $\tau_0$  el ancho temporal, en un medio Kerr con  $n_2 > 0$ . El índice de refracción aumenta primero y luego disminuye al pasar el pulso. Esto, a su vez, provoca un corrimiento auto-inducido en la fase del pulso  $\phi(t)$ , lo cual implica que también ocurrirá un corrimiento en la frecuencia *instantánea*,  $\omega(t) = d\phi(t)/dt = \omega_0 - k_0 L dn(I)/dt$ , donde  $L$  es la distancia recorrida por el pulso y  $\phi(t)$  representa la fase del pulso. En nuestro ejemplo, el frente del pulso sufrirá un corrimiento de frecuencias hacia el rojo, mientras que la parte de atrás sufrirá un corrimiento hacia el azul. Así, la dispersión se compensa con los efectos no lineales para producir el solitón temporal.

La ecuación que satisface la envolvente tiene exactamente la misma forma que la ecuación (12.5). Sólo hay que reemplazar  $x \rightarrow \tau = (t - z/v_g)$ , mientras que los coeficientes, para un medio Kerr, corresponden a  $\alpha = (dv_g/d\omega)(1/v_g^2)$ ,  $\beta = (n_2/\eta_0)k$  y  $\gamma = 1$ . Nótese que el uso de la variable  $\tau$  implica que el sistema de referencia en el que se describe el pulso viaja junto con él a la velocidad de grupo.

Como vemos, los efectos no lineales producidos por un paquete de ondas localizado espacial o temporalmente son *auto-inducidos*, por lo que se puede decir que el paquete interactúa consigo mismo a través del medio.

Para terminar, consideremos un ejemplo de solitones en el contexto de la física cuántica, en condensados de Bose-Einstein (BECs, por sus siglas en inglés). La idea de que se pueden producir solitones en un BEC es bastante natural, ya que éstos están descritos por la ecuación de Gross-Pitaevskii (GP), que tiene la forma de una ecuación NLS. La primera realización experimental fue de solitones oscuros y se reportó por dos grupos de manera casi simultánea hacia el final de 1999 y principios del 2000. Poco después, en 2002, un grupo franco-italiano logró producir solitones brillantes en un BEC.

¿Pero por qué se lograron los solitones oscuros antes que los brillantes?

La primera especie atómica con que se produjeron los BECs fue el rubidio (ver [Capítulo 36](#)) y posteriormente el sodio. El término no lineal en la ecuación GP está asociado con las interacciones interatómicas, y cuando éstas son repulsivas como en Rb o en Na, el signo de dicho término corresponde al caso análogo de un medio auto-desenfocante en óptica. Por el contrario, los solitones brillantes se observaron con átomos de litio ( ${}^7\text{Li}$ ), que tienen la peculiaridad de que su interacción se puede controlar, no sólo en magnitud sino también en signo, aplicando un campo magnético externo. Es decir, el término de interacción puede ser repulsivo, atractivo o cero, *sintonizando* adecuadamente el campo aplicado. El caso de una interacción atractiva es análogo al de un medio óptico auto-enfocante.

El rol de la intensidad óptica lo desempeña la densidad de átomos, que corresponde al módulo cuadrado de la función de onda que describe al BEC. Si el condensado está confinado en dos dimensiones, las ondas de materia presentan dispersión debido a las diferencias de energía cinética de los átomos en la dimensión espacial libre. En el experimento de 2002 el BEC se confinó ópticamente a lo largo de una guía de ondas unidimensional formada por un láser cuya frecuencia estaba lejos de la frecuencia resonante de los átomos, de tal manera que la nube condensada podía moverse libremente a lo largo del eje de propagación del haz (dirección  $z$ ), mientras que quedó confinada en las direcciones transversales ( $x, y$ ). De hecho, al término dispersivo en  $z$ , que era muy pequeño, se sumó un potencial magnético ligeramente repulsivo que también provocaba el ensanchamiento de la nube en la dirección  $z$ . Nuevamente, para ciertas condiciones, estos dos efectos se lograron compensar exactamente con la atracción interatómica que tendía a comprimir la nube, dando lugar al solitón.

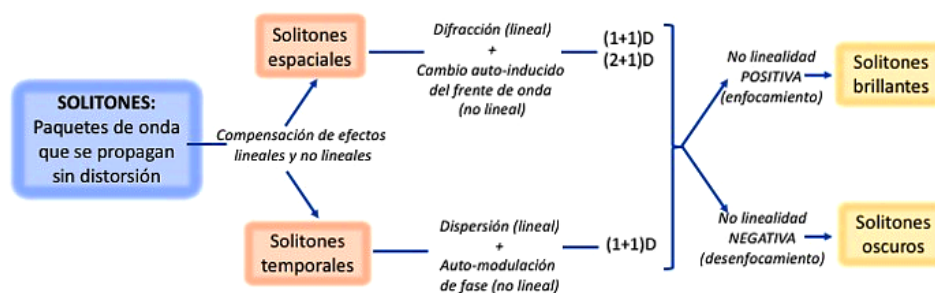


Figura 12.5: Mapa conceptual sobre solitones.

En la figura 12.5 se presenta un mapa conceptual que resume las prin-



cipales ideas discutidas hasta ahora. Como vimos, las condiciones que se deben cumplir para la formación de un solitón parecen tan específicas que cabe preguntarse si podrían darse fuera del laboratorio, de manera natural.

### ¿SOLITONES EN LA NATURALEZA?

Desde que el estudio de los solitones surgió como un tema relevante en la ciencia, muchos fenómenos naturales se han revisado y reinterpretado bajo esta nueva luz. Entre los ejemplos más notables hay varios fenómenos oceanográficos y atmosféricos de gran escala que han sido investigados como presuntos solitones, hipótesis que se ha confirmado sólo en algunos casos.

Un ejemplo interesante es el de los *solitones internos*, que ocurren entre dos capas de fluidos que no son miscibles. Esto pasa en el océano, donde se generan capas por diferencias en temperatura. Los solitones se presentan como una onda solitaria en la interfaz, que penetra desde la capa superior de mayor temperatura hacia abajo en la capa más fría, con una amplitud de varios cientos de metros, viajando sin sufrir distorsión. Éstos son muy peligrosos para las plataformas petroleras de exploración en aguas profundas. Un signo visible del paso de un solitón interno es la presencia de uno o varios solitones en la superficie; ambos pueden tener extensiones de cientos de kilómetros en la dirección transversal a su propagación.

Otro fenómeno digno de mencionar son los solitones de Rossby; se trata de ondas atmosféricas de gran escala causadas por la variación del efecto de Coriolis como función de la latitud y por gradientes de presión. También la atmósfera está estratificada y su dinámica está íntimamente ligada a la del océano. Las ondas de Rossby no pueden moverse en dirección Norte-Sur, por conservación del momento angular, de modo que se desplazan como ondulaciones en la frontera entre masas de aire frío cercanas a los polos y de aire caliente que viene desde el ecuador. Ocasionalmente pueden surgir ondas solitarias, similares a los solitones internos, que también se han descrito usando la ecuación KdV o versiones modificadas de ésta. Un ejemplo fascinante de lo que se ha interpretado como un solitón de Rossby es la gran mancha roja de Júpiter, que se ha observado a la misma latitud por cientos de años, manteniendo siempre su forma, incluso después de interactuar con otros objetos atmosféricos que también podrían ser solitones, como ocurrió a principios del siglo XX, en una interacción que duró varios años.

Finalmente, mencionaremos las incursiones de marea (tidal bores, en inglés), que ocurren cuando hay contraflujo en la desembocadura de un río

o canal causadas por marea alta. Éstas se han interpretado también como solitones. Ocurren en lugares donde el rango de variación de las mareas es grande (más de 6 m), cuando un río o canal poco profundo se va estrechando rápidamente desde su desembocadura, como un embudo. Cuando la marea sube en estas condiciones, pueden ocurrir estos incrementos repentinos en el nivel del agua a contraflujo del río. La energía cinética del agua a contraflujo a una velocidad mayor, se transforma en energía potencial generando la formación de una pared de agua que se desplaza río arriba. A veces aparecen como conjuntos de varios solitones en forma de crestas, donde el de mayor amplitud va adelante, seguido por otros cuya amplitud y velocidad va en orden descendente, lo cual es indicativo de que en efecto se trata de solitones.

Una pregunta muy legítima es si los tsunamis son solitones. No hay una respuesta general a esta pregunta, cada evento debe analizarse de manera independiente y aun así hay controversias. Los candidatos a solitones son aquellos tsunamis originados por terremotos muy violentos. Dos de los más analizados han sido el terremoto de Chile de 1960 y el de Sumatra de 2004. Para el primero no se cuentan con suficientes datos como para llegar a una conclusión contundente, ya que estos estudios requieren de información sísmológica alrededor del planeta y de imágenes satelitales, y aún así, la interpretación de los datos puede variar. En caso del tsunami de 2004, algunos análisis han arrojado que la propagación de la onda solitaria fue demasiado corta como para que los efectos de la dispersión fueran apreciables antes de alcanzar la costa, por lo que la dinámica no sería apropiadamente descrita por la ecuación KdV. Lo cierto es que, tanto el tsunami de Chile como el de Sumatra, siguieron viajando en otras direcciones durante más de 10 horas antes de encontrar otras costas (el de Chile viajó durante 22 horas antes de alcanzar la costa japonesa), por lo que la dispersión pudo efectivamente jugar un rol significativo a esas alturas.

Para cerrar, cabe mencionar que si bien todos los solitones son ondas solitarias, lo inverso no es cierto. Muchos sistemas físicos pueden estar descritos por algunos tipos universales de ecuaciones de onda no lineales y dispersivas y, desde el punto de vista matemático, si éstas son completamente integrables, el sistema tendrá soluciones tipo solitón. Es decir, no solo pueden representar entidades físicas observables, sino también pueden representar una descripción matemática útil y válida en diversas áreas de la ciencia. De hecho, las entidades físicas que se han identificado como solitones no necesariamente cumplen cabalmente con su definición matemática, y es que la Naturaleza es bastante más compleja que los modelos teóricos

que usamos para describirla.

#### ACRÓNIMOS

- **BEC:** Condensado de Bose-Einstein.
- **GP:** Gross-Pitaevskii.
- **KdV:** Korteweg-de Vries.
- **NLS:** (ecuación) No-Lineal de Schrödinger.
- **TF:** Transformada de Fourier.

#### PARA SABER MÁS:

- Lomdahl, P. S., *What is a soliton?*, Los Alamos Science, Vol. 10, (USA 1984) pp. 27-31.
- Infeld, E., Rowlands, G., *Nonlinear waves, solitons and chaos*, Cambridge University Press, New York USA, 1990, 423 pp.
- Khaykovich, L., Schreck, F., Ferrari, G., Bourdel, T., Cubizolles, J., Carr, L.D., Castin, Y., Salomon, C., *Formation of a Matter-Wave Bright Soliton*, Science, Vol. 296, 2002, pp.1290-1293.
- Lakshmanan, M., *Solitons, Tsunamis and Oceanographical Applications of*, en Mathematics of Complexity and Dynamical Systems, Springer, New York, 2012, pp.1603-1617.
- Fujioka, J., *NLS: una introducción a la ecuación no lineal de Schrodinger*, Serie FENOMECA, IIMAS-UNAM, México, 1996, 132 pp.

#### REFERENCIAS

- [1] G. I. Stegeman y M. Segev, «Optical Spatial Solitons and Their Interactions: Universality and Diversity», *Science*, vol. 286, n.º 5444, págs. 1518-1523, nov. de 1999.
- [2] R. W. Boyd, «7.5 Pulse Propagation and Temporal Solitons», en *Nonlinear Optics (Third Edition)*, R. W. Boyd, ed., Burlington: Academic Press, ene. de 2008, págs. 375-383.

- [3] B. E. A. Saleh y M. C. Teich, «Electromagnetic Optics», en *Fundamentals of Photonics*, New York: John Wiley & Sons, Ltd, 1991, págs. 157-192.

## ONDAS GRAVITACIONALES

*Miguel Alcubierre\**

**Las ondas gravitacionales, predichas por Einstein hace más de 100 años, fueron detectadas por primera vez en septiembre del 2015. Estas ondas son una de las predicciones mas espectaculares de la relatividad general, y representan distorsiones de la geometría del espacio-tiempo que se originan en los eventos astrofísicos mas violentos del Universo y se propagan a la velocidad de la luz. Después de varias décadas en que su existencia fue puesta en duda, en la década de 1960 Joseph Weber realizó los primeros intentos por detectarlas. A mediados de la década de 1990 se inició la construcción de gigantescos observatorios de ondas gravitacionales que finalmente dieron frutos en septiembre de 2015 cuando se detectó por primera vez la señal en ondas gravitacionales provenientes de la colisión de dos agujeros negros. Mas recientemente, en agosto de 2017, se detectó la señal de la colisión de dos estrellas de neutrones en coincidencia con un destello de rayos gamma, un evento que también fue detectado por decenas de observatorios tanto en luz visible como luz infrarroja, rayos X y ondas de radio. La era de la astronomía de ondas gravitacionales ha comenzado.**

El 11 de febrero de 2016 se llevó a cabo, en las oficinas de la National Science Foundation (NSF) de los Estados Unidos, una de las conferencias de prensa mas importantes para el mundo de la física de las últimas décadas. Al inicio de dicha conferencia de prensa, David Reitze, director ejecutivo del Observatorio Gravitacional por Interferometría Láser (LIGO por sus siglas en inglés), pronunció unas breves palabras que maravillaron a la comunidad científica internacional: “Señoras y señores, hemos detectado ondas gravitacionales, lo logramos”. Este anuncio dio inicio a una nueva

---

\*Departamento de Gravitación y Teorías de Campo, Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México.

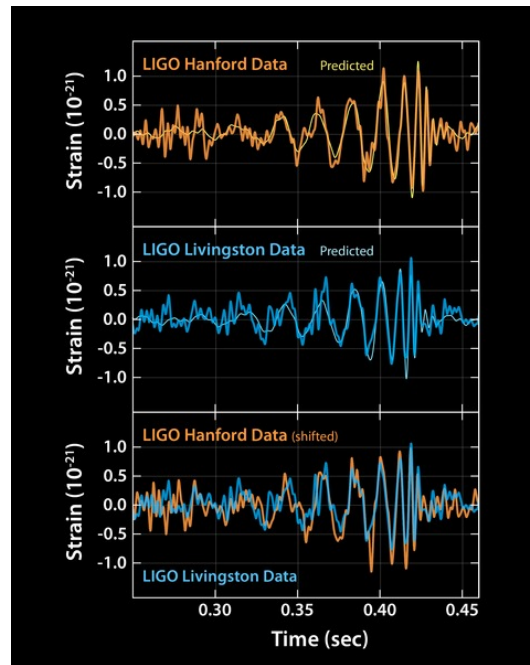
era en la astronomía, y confirmó la última gran predicción de la relatividad general de Einstein.

La relatividad general es la teoría moderna de la gravitación. Postulada por Einstein en 1915, la relatividad general ha mostrado tener un enorme poder predictivo y a la fecha ha pasado con extraordinaria precisión todas las pruebas experimentales y observacionales a que se le ha sometida. Entre sus logros se encuentran la predicción de objetos exóticos como las estrellas de neutrones y los agujeros negros, así como el modelo cosmológico de la Gran Explosión.

Al ser la relatividad general una teoría de campo, una de sus predicciones más importantes es la existencia de las ondas gravitacionales. Dichas ondas fueron predichas por Einstein en 1918, aunque durante cerca de 40 años no hubo un consenso sobre su realidad física ya que muchos investigadores consideraban que eran solamente un artefacto matemático. El mismo Einstein llegó a dudar su existencia en un artículo escrito junto con Nathan Rosen en 1936. La controversia terminó en la década de los cincuenta cuando varios trabajos por diversos autores mostraron que las ondas gravitacionales transportan energía, y por tanto debían ser fenómenos físicos reales. La primera evidencia indirecta de su existencia llegó en la década de los setenta en la forma del decaimiento de la órbita del pulsar binario descubierto por R. Hulse y J. Taylor.

Una detección directa, sin embargo, tuvo que esperar hasta el 14 de septiembre del 2015 [1]. Las ondas detectadas provenían de la colisión de dos agujeros negros, con masas de aproximadamente 29 y 36 masas solares respectivamente, a una distancia de la Tierra de unos 1 300 millones de años luz. El resultado de la colisión fue un agujero negro final de 62 masas solares, las tres masas solares restantes se convirtieron en la energía de las ondas gravitacionales en menos de una décima de segundo. Por un instante, el evento fue el más luminoso de todo el Universo observable. Pero esa enorme luminosidad no fue en luz, sino en perturbaciones en la geometría del espacio. De entonces a la fecha se han detectado otros 4 eventos correspondientes a la colisión de agujeros negros. Pero quizá la detección más espectacular se dio el 17 de agosto de 2017, cuando por primera vez se detectó una señal en ondas gravitacionales en coincidencia con un destello de rayos gamma [2]. Dicha señal provino del choque de dos estrellas de neutrones a unos 130 millones de años luz de distancia, y pudo ser observada por decenas de observatorios alrededor del mundo en todo el espectro electromagnético (rayos gamma, rayos X, luz visible, luz infrarroja y ondas de radio), mostrando por primera vez que los destellos de rayos gamma de

corta duración están asociados al choque de estrellas de neutrones. Nos encontramos ante el nacimiento de una nueva astronomía: la astronomía de ondas gravitacionales.



**Figura 13.1:** Señal de las ondas gravitacionales detectadas por los dos observatorios del proyecto LIGO en Livingston, Luisiana, y en Hanford, Washington.

#### LAS ONDAS GRAVITACIONALES

En 1905 Einstein desarrolló la teoría especial de la relatividad especial, y mostró que era posible reconciliar el principio de relatividad de Galileo que dice que las leyes de la física toman la misma forma en todo sistema inercial, con la teoría electromagnética y el hecho de que la velocidad de la luz era siempre la misma. El precio a pagar, sin embargo, era alterar radicalmente los conceptos newtonianos del espacio y del tiempo. En la teoría de la relatividad de Einstein, por ejemplo, las distancias y el flujo del tiempo no son absolutos sino que dependen del movimiento del observador: relojes en movimiento se atrasan, y reglas en movimiento se acortan. Además, eventos que ocurren a un mismo tiempo de acuerdo a un observador, ocurren a tiempo distintos para otro observador que se mueve respecto al

primero: la simultaneidad es relativa.

La versión inicial de la relatividad especial era puramente algebraica, pero en 1908 Hermann Minkowski descubrió que era posible reescribir toda la teoría de forma geométrica introduciendo un espacio-tiempo de 4 dimensiones con una medida de “distancia” invariante dada por:

$$ds^2 = c^2 dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2, \quad (13.1)$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz. Esta distancia invariante en general se reescribe de forma compacta como:

$$ds^2 = \sum_{\mu, \nu=0}^3 \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu, \quad (13.2)$$

con  $(x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z)$ , y donde  $\eta_{\mu\nu}$  es el así llamado *tensor métrico de Minkowski*:

$$\eta_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (13.3)$$

Para 1907 Einstein había concluido que la teoría de la gravitación universal de Newton con su acción a distancia instantánea era incompatible con la relatividad especial, e inició una búsqueda de una nueva teoría relativista de la gravedad. Basándose en el “principio de equivalencia” (Capítulo 6), que indica que en caída libre la fuerza de gravedad no puede medirse, Einstein concluye que el campo gravitacional debe asociarse con una distorsión de la geometría plana de Minkowski: la gravedad curva el espacio-tiempo. En la relatividad general la distancia invariante debe estar dada entonces por una generalización de la distancia de Minkowski:

$$ds^2 = \sum_{\mu, \nu=0}^3 g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu, \quad (13.4)$$

donde ahora  $g_{\mu\nu}$  es un tensor métrico general que varía de un lugar a otro y representa la geometría de un espacio-tiempo curvo.

La nueva teoría de la relatividad general es presentada en forma final por Einstein a fines 1915. Las ecuaciones de campo de esta teoría relacionan la geometría del espacio-tiempo con la distribución de materia y energía, y tienen la forma:

$$G_{\mu\nu} = \frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu}, \quad (13.5)$$



donde  $G$  es la constante de la gravitación universal de Newton,  $c$  es la velocidad de la luz,  $T_{\mu\nu}$  es el “tensor de energía-momento” de la materia, y  $G_{\mu\nu}$  es el “tensor de curvatura de Einstein” que es una combinación complicada de segundas derivadas del tensor métrico  $g_{\mu\nu}$ . Pese a ser aparentemente sencillas, estas ecuaciones forman en realidad un sistema de 10 ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden en 4 dimensiones, acopladas, no lineales, y con miles de términos. Resolverlas de manera exacta es sumamente difícil en la mayoría de los casos, pero es posible avanzar considerablemente si se consideran soluciones aproximadas.

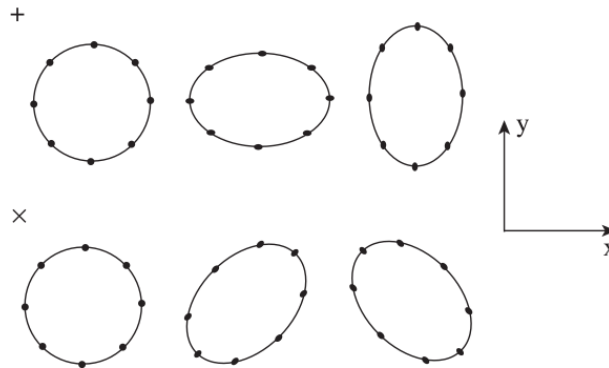
La aproximación mas sencilla es considerar un campo gravitacional débil correspondiente a un espacio-tiempo casi plano, en cuyo caso el tensor métrico se puede aproximar como una pequeña perturbación del tensor de Minkowski:

$$g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} + h_{\mu\nu} , \quad |h_{\mu\nu}| \ll 1 . \quad (13.6)$$

Asumiendo ahora que estamos en el vacío ( $T_{\mu\nu} = 0$ ), y con una elección adecuada del sistema de coordenadas (una elección de “norma”), es posible reducir las ecuaciones de campo a:

$$\square h_{\mu\nu} = 0 , \quad (13.7)$$

donde  $\square = \sum_{\mu,\nu=0}^3 \eta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu = (1/c^2) \partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2$  es el llamado operador de d’Alambert u operador de onda. La ecuación anterior implica que en el vacío las perturbaciones del campo gravitacional se propagan precisamente como ondas que viajan a la velocidad de la luz: las ondas gravitacionales.



**Figura 13.2:** Efecto de las ondas gravitacionales sobre un anillo de partículas libres. Para la polarización + el anillo oscila en las direcciones  $x$  y  $y$ , mientras que para la polarización  $\times$  la oscilación está rotada a las direcciones diagonales.

Diversas consideraciones técnicas permiten concluir que las ondas gravitacionales son de carácter transversal y tienen solo dos grados de libertad, es decir, dos polarizaciones. Debido al su carácter tensorial, y a diferencia de las ondas electromagnéticas, dichas polarizaciones están rotadas a 45 grados una de la otra. Si se tiene un anillo de partículas libres flotando en el espacio, el efecto de una onda gravitacional que se mueve en una dirección perpendicular al anillo será causar una oscilación que lo estirará y comprimirá de manera alternada como se muestra en la figura 13.2.

#### DETECTORES DE ONDAS GRAVITACIONALES

Las ondas gravitacionales fueron predichas inicialmente hace más de un siglo, por lo que puede parecer sorprendente que hayan sido detectadas apenas en el 2015. La razón de ello tiene que ver con la intensidad de la gravedad. De las 4 fuerzas fundamentales que conoce la física, la gravedad es por mucho la más débil. El campo gravitacional de un electrón, por ejemplo, es 40 órdenes de magnitud más débil que su campo eléctrico. Esto implica que para poder generar ondas gravitacionales lo suficientemente intensas como para ser detectadas se requiere tener objetos con masas estelares que se muevan unos respecto a otros a fracciones significativas de la velocidad de la luz. Es decir, se requiere de eventos astrofísicos altamente violentos, como por ejemplo una supernova, o la colisión de objetos compactos tales como estrellas de neutrones o agujeros negros. Peor aún, estos fenómenos son tan poco comunes que difícilmente podemos esperar que ocurran en nuestra galaxia más allá de una vez cada varios siglos. La esperanza está en detectarlos cuando ocurren a distancias de decenas o cientos de megaparsecs, correspondientes a un volumen cosmológico con miles o incluso millones de galaxias. Pero a estas distancias la intensidad de las ondas al llegar a la Tierra es extremadamente baja.

Cálculos sencillos indican que las ondas gravitacionales producidas por la colisión de objetos compactos a distancias de decenas o cientos de megaparsecs produciría un efecto en la Tierra de solo una parte en  $10^{21}$ . Es decir si consideramos un círculo de partículas de un metro de diámetro, dichas ondas cambiarían el tamaño del círculo en una distancia equivalente a la millonésima parte del diámetro de un protón.

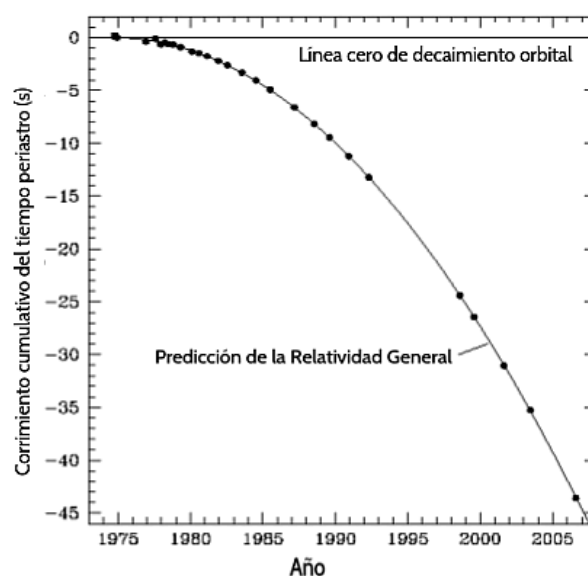
Los primeros intentos por detectar ondas gravitacionales fueron llevados a cabo por Joseph Weber. En 1960 Weber publicó un trabajo donde describía una “antena gravitacional”, y durante los siguientes años construyó el primer detector de ondas gravitacionales que consistía en una barra de

aluminio de 60 cm. de ancho y un par de metros de largo, con un peso de poco mas de una tonelada, a la que se habían adherido una serie de cristales piezoeléctricos (véase la figura 13.3). Al interactuar una onda gravitacional con la barra, ésta se pondría a oscilar y entraría en resonancia, amplificando las oscilaciones hasta que pudieran ser detectadas. Weber construyó dos barras, y colocó una en la Universidad de Maryland y la otra en el Argonne National Laboratory en Chicago, con la idea de que si ambas barras detectaban lo mismo de manera simultanea uno podía estar seguro de que no se trataba de una oscilación producida por movimientos sísmicos locales. Para sorpresa de toda la comunidad científica, Weber anunció en 1969 que había detectado ondas gravitacionales provenientes del centro de la Vía Láctea. Durante los siguientes años varios grupos experimentales construyeron sus propias barras resonantes e intentaron reproducir las observaciones de Weber sin ningún éxito. Mas aún, diversos estudios teóricos mostraron que no era posible entender en términos astrofísicos la intensidad de las ondas que Weber decía detectar, ya que se requeriría que en el centro de la galaxia se convirtieran varias masas solares por día en ondas gravitacionales. Para fines de la década de los setenta el consenso de la comunidad era que Weber no había detectado realmente ondas gravitacionales, aunque él siguió afirmándolo hasta su muerte.



**Figura 13.3:** Joseph Weber con su detector de ondas gravitacionales en la Universidad de Maryland a principios de los años setenta.

Por otro lado, a mediados de los setenta se obtuvo la primera evidencia indirecta de la existencia de las ondas gravitacionales con el descubrimiento del primer pulsar binario por parte de Russel Hulse y Joseph Taylor. Durante varios años después del descubrimiento, Taylor estudió la evolución del período orbital de este sistema, y para 1978 pudo mostrar que la binaria perdía energía orbital de manera consistente con la la emisión de ondas gravitacionales predicha por la relatividad general (véase figura 13.4). Hulse y Taylor recibieron el premio Nobel de física en 1993 por el descubrimiento del pulsar binario.



**Figura 13.4:** Decaimiento de la órbita del pulsar binario de Hulse y Taylor (PSR 1913+16), y comparación con la predicción de la relatividad general por pérdida de energía debida a la emisión de ondas gravitacionales.

De manera paralela, varios investigadores comenzaron a pensar en la posibilidad de construir detectores de ondas gravitacionales utilizando interferómetros en vez de barras resonantes, en particular Rainer Weiss, Ronald Drever y Kip Thorne, quienes en 1990 presentaron una propuesta ante la NSF de los Estados Unidos para construir un interferómetro de 4 km de brazo, el proyecto LIGO. Siguiendo la lógica de Weber, LIGO consistía de dos interferómetros independientes a 3 000 kilómetros de distancia, uno de ellos cerca de Livingston, Luisiana, y el otro en Hanford, Washington. Los detectores comenzaron a construirse en 1994. Durante los siguientes años

propuestas similares en Europa dieron lugar al proyecto VIRGO consistente en un interferómetro de 3 km de brazo cerca de la ciudad de Pisa, y al proyecto GEO600 de 600 m de brazo cerca de Hanover. Mas recientemente, en Japón se ha iniciado ya la construcción del detector subterráneo KAGRA, de tamaño similar a VIRGO. Los detectores de escala de kilómetros son sensibles a ondas gravitacionales con frecuencias en un rango de 10 a unos 2 000 Hertz, lo que los hace ideales para detectar ondas provenientes de sistemas astrofísicos de masas estelares.



**Figura 13.5:** El interferómetro de LIGO en Livingston, Luisiana.

La versión inicial de los detectores de LIGO tenía una sensibilidad marginal de apenas un parte en  $10^{21}$ , lo que en la práctica significaba que deberían hacer una detección una vez cada varias décadas. Del 2005 al 2010 se realizó una serie de corridas científicas de observación con duración de varias semanas a la vez, sin ninguna detección. A partir de 2010 se inició el proyecto LIGO avanzado, que consistía en una serie de mejoras en diversos sistemas, incluyendo el material y suspensión de los espejos, y la potencia del láser, entre otros. LIGO avanzado inició su operación en septiembre de 2015 con una sensibilidad aproximadamente 20 veces mayor a la de la versión inicial. El esfuerzo rindió frutos casi de inmediato, con la primera detección confirmada el 14 de septiembre, y una segunda el 26 de

diciembre.

Vale la pena mencionar que los detectores de ondas gravitacionales son antenas esencialmente omni-direccionales (aunque con un cierto patrón de antena), y por si solos no dan ninguna información sobre la dirección de la que proviene una señal. Cada detector nos provee únicamente de una señal que varía con el tiempo, correspondiente a la oscilación de la geometría del espacio detectada a partir del movimiento de los espejos del interferómetro. Se requiere de varios detectores (al menos dos) para poder inferir la dirección de la que proviene la onda utilizando la diferencia en los tiempos de arribo de la señal.

#### SIMULACIONES DE COLISIONES DE AGUJEROS NEGROS

De manera paralela a los esfuerzos por detectar ondas gravitacionales de manera directa, varios grupos teóricos buscaron la forma de estudiar fuentes astrofísicas de ondas gravitacionales. Las ecuaciones de campo de la relatividad general son tan complejas que no hay ninguna esperanza de poder resolverlas de manera exacta en situaciones astrofísicas realistas, por lo que se requería de simulaciones numéricas en computadora. El esfuerzo se concentró principalmente en el estudio del problema de dos cuerpos mas simple en la relatividad general, el de dos agujeros negros en órbita.

Debido a la emisión de ondas gravitacionales, el problema de dos cuerpos en relatividad general no resulta en órbitas cerradas: las ondas se llevan energía del sistema por lo que la órbita se hace cada vez mas compacta. Los agujeros negros (o estrellas) siguen trayectorias espirales que culminan, después de millones de años, en una colisión violenta. Históricamente, el primer intento de simular la colisión de dos agujeros negros en una computadora fue el de S. Hahn y R. Lindquist en 1964. Para simplificar el problema, en este trabajo estudiaron una colisión de frente, que si bien no es realista desde un punto de vista astrofísico, simplifica de manera considerable el cálculo.

Las simulaciones de colisiones de frente avanzaron de manera considerable en la década de los setenta gracias al trabajo de L. Smarr y K. Eppley. Sin embargo, la simulación de dos agujeros negros en órbita mostró ser mucho mas compleja, y el problema no fue resuelto de manera exitosa sino hasta el 2005 con el trabajo seminal de F. Pretorius. Al día de hoy, varios grupos a nivel internacional son capaces de realizar simulaciones de la colisión en espiral de dos agujeros negros con distintas masas y momento angular. Dichas simulaciones son altamente sofisticadas y precisas, y permiten estu-

diar en detalle no solo la dinámica de los agujeros negros, sino la señal de las ondas gravitacionales emitidas durante la colisión, así como la energía, momento angular y momento lineal radiados.

En los últimos 10 años se han realizado cientos de estas simulaciones, lo que ha permitido crear un catálogo de señales de ondas gravitacionales para agujeros negros con distintos parámetros iniciales (masas, momento angular, excentricidad, etc.), que pueden utilizarse para ajustar las observaciones reales. Es gracias a la existencia de este catálogo de formas de onda que fue posible ajustar la señal detectada el 14 de septiembre de 2015, y deducir no solo que se trató de la colisión de dos agujeros negros, sino cuales eran las masas iniciales y final.

Más recientemente se han llevado a cabo simulaciones cada vez más sofisticadas de colisiones ya no de agujeros negros, sino de estrellas de neutrones que incluyen hidrodinámica relativista y campos magnéticos intensos. Estas simulaciones están limitadas en este momento por nuestro desconocimiento de la ecuación de estado de la materia neutrónica a altas densidades. Las observaciones de ondas gravitacionales provenientes del choque de estrellas de neutrones nos permitirán entonces calibrar las simulaciones y entender el comportamiento de la materia a esas densidades.

## CONCLUSIONES

Las observaciones de ondas gravitacionales de septiembre de 2015 reportadas por el proyecto LIGO marcaron el inicio de la era de la astronomía de ondas gravitacionales. A la fecha se han detectado otros 4 eventos correspondientes a la colisión de agujeros negros. El detector italiano VIRGO en su versión avanzada inició operaciones mediados de 2017 y ya ha participado en la observación de al menos una colisión de dos agujeros negros. Aunado a esto, el observatorio KAGRA, ubicado en la mina Kamioka en Japón, se encuentra ya en estado avanzado de construcción y se espera sea concluido antes de que termine este década. Por otro lado, recientemente fue aprobado el proyecto para el observatorio LIGO-India. Todo esto significa que en el transcurso de los próximos 10 años contaremos con 4 o 5 detectores avanzados de ondas gravitacionales en Tierra.

Más aún, el proyecto LISA (Large Interferometer Space Antenna) pretende colocar tres satélites en una configuración de triángulo equilátero en órbita solar, que funcionarían como un interferómetro de millones de kilómetros de brazo. Dicho interferómetro sería sensible a un rango de frecuencias muy bajas, lo que le permitiría detectar colisiones de agujeros negros

supermasivos en el centro de galaxias, y tal vez el fondo estocástico de ondas gravitacionales.

En agosto de 2017 se detectó por primera vez una señal de ondas gravitacionales en coincidencia con un destello corto de rayos gamma, proveniente de la colisión de dos estrellas de neutrones a una distancia de 130 millones de años luz. Dicho evento fue posteriormente observado en luz visible, lo que permitió determinar la galaxia de origen, y fue seguido por decenas de observatorios, tanto espaciales como terrestres, en todo el espectro electromagnético. El evento, bautizado como una “kilonova” por involucrar energías unas mil veces mayores que una nova (y 100 veces menores que una supernova), ha dado inicio a la era de la astronomía multimensajero. Observar mas eventos como este nos dará información muy valiosa sobre el origen de los elementos pesados, así como las propiedades de la materia neutrónica a densidades nucleares, y nos permitirá medir con altísima precisión la constante de Hubble.

La detección directa de las ondas gravitacionales dio lugar a que el premio Nobel de física 2017 fuera otorgado a los proponentes iniciales de LIGO, Rainer Weiz y Kip Thorne (Ronald Drever había fallecido unos meses antes), junto con Barry Barish, quien fuera el primer director de LIGO.

Por supuesto, como ocurre siempre que se abre una nueva ventana al Universo, seguramente los detectores de ondas gravitacionales nos darán sorpresas que nos permitirán estudiar sistemas que aún no nos imaginamos. La astronomía de ondas gravitacionales apenas comienza.

#### PARA SABER MÁS:

- Flores Valdés, J., *La gran ilusión III*, colección “La Ciencia Desde México”, volumen 41, Fondo de Cultura Económica, 1988.
- Bartusiak, M., *La sinfonía inacabada de Einstein*, Editorial Océano, Barcelona, 2002.
- Cervantes-Cota, J., Galindo-Uribarri, S., Smoot, G.F., *A brief history of gravitational waves*, Universe 2, 22. (2016).
- Hacyan, S., *Ondas gravitacionales: las olas invisibles del Universo*, colección “La Ciencia Para Todos”, Fondo de Cultura Económica, 2018.
- [\*Proyecto LIGO\*](#).



- **Proyecto VIRGO.**
- **Proyecto GEO600.**

## REFERENCIAS

- [1] LIGO Scientific Collaboration and Virgo Collaboration, B. P. Abbott, R. Abbott y col., «Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger», *Physical Review Letters*, vol. 116, n.º 6, pág. 061 102, feb. de 2016.
- [2] LIGO Scientific Collaboration and Virgo Collaboration, B. P. Abbott, R. Abbott y col., «Gw170817: Observation of Gravitational Waves from a Binary Neutron Star Inspiral», *Physical Review Letters*, vol. 119, n.º 16, pág. 161 101, oct. de 2017.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

### **III**

## **SISTEMAS CLÁSICOS ANÁLOGOS**



## LOS CAMINOS EXTREMOS DE LA LUZ

*Rubén G. Barrera\**

En este texto se revisan los antecedentes a la ley de refracción durante la época de oro de la ciencia en el Islam, haciendo referencia a los tratados sobre óptica realizados en los siglos X y XI y el uso magistral de la ley de refracción descubierta por Ibn Sahal. Después se comentan las mediciones de Snell y se relata la controversia entre Descartes y Fermat sobre la deducción de la ley de refracción propuesta por Descartes. Se revisan los argumentos de ambos y la proposición de Fermat de tratar el problema en base a sus investigaciones sobre máximos y mínimos. Finalmente se comenta la deducción de Fermat en base a lo que hoy llamamos principio variacional, y se resalta el hecho, de que en su proceder, no tuvo necesidad de utilizar un modelo específico sobre la naturaleza de la luz.

La luz es, sin duda, uno de los fenómenos más apasionantes, complejos y misteriosos de nuestro mundo físico. Por algo, en muchas de las antiguas culturas se le adjudicaba un origen divino. Fueron los dioses los que crearon la luz, y fue la luz la que precedió la existencia de todo lo demás, asociando el caos a la oscuridad y el orden a la luz. Llevo ya muchos años de mi vida estudiando la luz y su interacción con la materia, y sigo sin entender, a ciencia cierta, ¿qué es la luz? Lo que quiero contarles en este texto, es que aún sin saber lo que es realmente la luz, hemos sido capaces de controlar su camino, y controlando y diseñando los caminos que debe seguir la luz, ha sido posible construir instrumentos muy sofisticados, que van desde poderosos microscopios hasta grandes telescopios y cámaras fotográficas de gran resolución.

¿Qué quiero decir con controlar los caminos de la luz? Por ejemplo, lo primero que se observa es que la luz camina en línea recta, a menos que

---

\*Departamento de Física Química, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

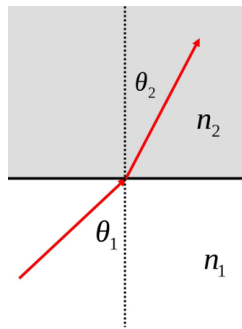
encuentre materia a su paso; los rayos de luz se propagan en línea recta. Sin embargo, que esto se haya observado muchas, muchas veces, no prueba que así va a suceder siempre; a pesar de eso, se puede proponer que así siempre será, haciendo de esa proposición una ley, una ley sobre el comportamiento de la luz. Esta forma de proceder, que puede parecer un tanto arriesgada y atrevida, es una de las formas de proceder de los físicos. A veces, al analizar una cierta regularidad en un conjunto de observaciones, se propone que esa regularidad deba ser más general y deba cumplirse, no sólo en ese caso, sino en todos los demás casos, y esta última afirmación tan tajante y extensiva, la convierte en una ley, en una ley física. Otras veces, alguien puede intuir o especular en un acto creativo, que si se obedece una cierta relación entre ciertas cantidades físicas, muchos de los fenómenos relacionados con estas cantidades, podrían ser explicados de forma coherente; ésta sería otra forma de proponer una ley. Pero dada su génesis, no es de sorprenderse que algún día, alguien pueda encontrar situaciones en que la ley no se cumpla. En nuestro caso, la ley que afirma, que un rayo de luz se propaga en línea recta si no encuentra materia a su paso, es una ley que se mantuvo válida durante siglos, y no fue sino hasta principios del siglo XX, cuando se encontraron situaciones en que esto no sucedía; pero por el momento vamos a ignorarlas y supondremos, en este texto, que la ley es correcta, es decir, que aunque no sepamos de que están hechos los rayos de luz, o que son, éstos se propagan en línea recta, mientras su camino esté libre de materia.

Pero ¿qué pasa cuando los rayos de luz se encuentran con la materia?, bueno, pues pueden pasar muchas cosas, pero lo primero que tenemos que precisar es el tipo de materia con la que se encuentran, ya que la materia es en sí, muy, muy diversa. En este texto vamos a restringirnos a dos tipos de materia: los espejos y los materiales transparentes como el agua, el aire y el vidrio, dentro de los cuales los rayos de luz se propagan, sin atenuarse apreciablemente. En contraposición a este tipo de materiales, están los materiales opacos, materiales que la luz no puede atravesar, porque la luz es absorbida en su seno. Uno podría pensar que nos estamos restringiendo demasiado, dirigiendo nuestra atención a materiales muy particulares; sin embargo, si vemos el interior de un microscopio, de un telescopio, de una cámara fotográfica o de un complejo instrumento óptico, encontraremos un intrincado diseño de espejos, lentes y prismas, todos hechos de vidrio. Estos diseños están pensados para controlar y dirigir a los rayos de luz por caminos específicos, con el objetivo de poder ver lo muy pequeño o lo muy lejano o para reproducir una determinada imagen; y todos estos dispositivos se han podido construir, porque se conoce con precisión lo que

les sucede a los rayos de luz cuando encuentran en su camino un espejo, un prisma o una lente. Lo que sabemos, es que los espejos y los prismas cambian el camino de los rayos de luz, los primeros la reflejan y los segundos la refractan. Las leyes que obedecen estos cambios en el camino de los rayos son relativamente simples, por ejemplo, la ley de reflexión establece, que el ángulo de incidencia es igual al ángulo de reflexión, en donde los ángulos se miden con respecto a la normal al espejo. Esta ley fue postulada hace ya muchos años, por Herón de Alejandría, en el siglo I de nuestra era. La ley de refracción es un poco más complicada, no mucho más, y tanto su significado como su génesis son los temas centrales del presente texto.

#### LA REFRACCIÓN

El fenómeno de refracción es el cambio en el camino de los rayos de luz cuando atraviesan la interfaz entre dos medios transparentes, como por ejemplo una interfaz plana entre el aire y el vidrio; se dice entonces, que el rayo se “dobla” al entrar al vidrio (ver figura 14.1). Si el rayo va del aire al vidrio, e incide a un ángulo  $\theta_1$  con respecto a la normal a la interfaz, la dirección del rayo refractado cambia y se “dobla” hacia a la normal, haciendo ahora un ángulo  $\theta_2$ , en donde  $\theta_2 < \theta_1$ ; entre más pequeño es  $\theta_2$ , o sea, en cuanto la dirección del rayo refractado se aproxima más a la normal, se dice que el material en lo que esto sucede, tiene un mayor “poder refractor”. Este término “poder refractor”, es el que se usaba antes de que Thomas Young introdujera el concepto de índice de refracción en 1807, y el “poder refractor” corresponde al índice de refracción relativo  $n_2/n_1$ , en donde  $n_i$  ( $i = 1, 2$ ) denota el índice de refracción del medio  $i$ .



**Figura 14.1:** Rayo de luz incidiendo con un ángulo  $\theta_1$  en una interfaz entre dos medios con índices de refracción  $n_1$  y  $n_2$ , El rayo se refracta con un ángulo  $\theta_2$ .

Los primeros intentos, de los que tenemos registro, para determinar la ley de refracción, datan del siglo I de nuestra era, y fueron las mediciones realizadas en Alejandría, por Claudio Ptolomeo, y reportadas en su libro intitulado: *óptica*, en el que trata los fenómenos de reflexión y refracción de la luz, así como la sensación del color. Claudio Ptolomeo o Ptolomeo, a secas, es el mismo que escribió el tratado de astronomía conocido como *El Almagesto*, en el que postuló la teoría geocéntrica como modelo del universo. En sus estudios sobre la luz reportados en su *óptica*, Ptolomeo relata su experiencia de hacer incidir un rayo de luz proveniente del aire a un recipiente transparente lleno de agua, y de medir, para distintos ángulos de incidencia, los correspondientes ángulos de refracción, encontrando los valores de la tabla 14.1.

Aire	Agua	Diferencias
10	8	$7\frac{1}{2}$
20	$15\frac{1}{2}$	7
30	$22\frac{1}{2}$	$6\frac{1}{2}$
40	29	6
50	35	$5\frac{1}{2}$
60	$40\frac{1}{2}$	5
70	$45\frac{1}{2}$	$4\frac{1}{2}$
80	50	

**Tabla 14.1:** Ángulos de incidencia (aire) y refracción (agua) medidos por Ptolomeo.

En la primera columna de la tabla aparece el ángulo de incidencia y en la segunda, el ángulo de refracción. Como vemos, el ángulo de refracción es siempre menor al de incidencia, indicando que el rayo refractado se “dobla” hacia la normal, debido al poder refractor del agua. Ahora sabemos que las mediciones de Ptolomeo no fueron suficientemente precisas, porque no corresponden a las que ahora consideramos correctas. Esto es fácil de entender dadas las limitaciones de los instrumentos de medición de la época; sin embargo, lo más interesante aparece en la tercera columna, en donde se registra la diferencia de los ángulos de incidencia y refracción. Como vemos, estas diferencias generan una serie aritmética, y se especula que ésto fue lo que convenció a Ptolomeo de que sus mediciones eran correctas. Esta especulación se basa en ciertos rasgos de la cultura helénica, relacionados con la creencia de que la naturaleza debía seguir las reglas de la matemática, y la aparición de una serie aritmética en las diferencias

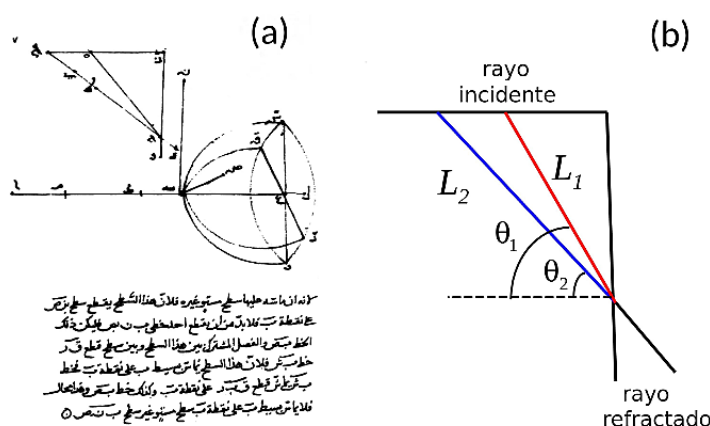


angulares, concordaba muy bien con esa creencia; sin embargo esto es sólo una especulación, ya que otros piensan, que en realidad los datos presentados por Ptolomeo, no fueron el resultado de sus mediciones, sino que fueron calculados utilizando una incorrecta ley cuadrática; otra especulación difícil de corroborar. Posteriormente, cuando el cristianismo se impone en Europa como la visión oficial del mundo, el interés por encontrar las leyes que sigue el comportamiento de la luz, se desvanece por completo; y no es sino hasta el siglo X, en el seno del mundo islámico, cuando el interés por la luz y sus leyes, vuelve a aparecer con mucha intensidad.

## EL ISLAM

Es en la llamada época de oro del Islam, cuando florecen, entre otras ciencias, la matemática, la óptica, la medicina; y es en esta época cuando Ibn Sahl descubre y utiliza con maestría la ley de refracción de la luz. Ibn Sahl vive en el Bagdad del siglo X, durante el califato abasida que fomentó las traducciones de los clásicos griegos al árabe. Ibn Sahl conocía y había estudiado la *óptica* de Ptolomeo, y discrepaba de los resultados ahí presentados sobre la refracción de la luz. En 983 escribe un tratado de óptica intitulado: *Sobre espejos ustorios y lentes*, donde espejos ustorios significa espejos que queman. Este tratado fue rescatado, reconstruido y traducido por Roshdi Rashed [1], a partir de dos manuscritos originales encontrados en dos bibliotecas diferentes: una en Bagdad y otra en Teherán, y publicado en *Géométrie et Dioptrique au Xe siècle: Ibn Sahl, al-Quhi et Ibn al-Haythan* (Collection Sciences et Philosophie Arabes, Textes et études, Paris: Les Belles Letres, 1993), en donde aparece la siguiente figura (ver figura 14.2).

Los triángulos que aparecen en la parte superior izquierda de esta figura se repiten, a un lado (figura 14.2b), con unos símbolos adicionales. En esta figura 14.2b, aparecen dos triángulos rectángulos con hipotenusas  $L_1$  y  $L_2$ , que corresponden a las direcciones de los rayos incidente y refractado, respectivamente; la línea vertical representa la interfaz entre el medio 1 y el medio 2, mientras que la línea horizontal es la normal a dicha interfaz. Rashed [1] apunta que en este diagrama el cociente entre las longitudes  $L_2/L_1$  corresponde al poder refractor del medio 2, que en términos modernos es igual al índice de refracción relativo, es decir al cociente  $n_2/n_1$ . Sin embargo, lo más importante en este diagrama es que ambos triángulos tienen un cateto común, y esto implica que  $L_1 \sin \theta_1 = L_2 \sin \theta_2$ , lo que equivale a decir que el cociente del seno del ángulo de incidencia sobre el seno del ángulo de refracción  $\sin \theta_1 / \sin \theta_2$  es constante e igual al poder refractor  $n_2/n_1$ ; que



**Figura 14.2:** (a) Diagrama encontrado en el libro de Ibn Sahl con texto en árabe y reproducido por R. Rashed [1]. Los triángulos que aparecen en la parte superior izquierda se repiten en (b), en donde se añaden caracteres latinos.

es la forma moderna de enunciar la ley de refracción. Por lo tanto, el diagrama de Ibn Sahl es considerado como una formulación geométrica de la ley de refracción, que le permitió trazar los rayos refractados por interfaces planas. Además, suponiendo que en superficies curvas los rayos se refractan como si incidieran en una superficie plana, que toca a la superficie curva en el punto por donde incide el rayo, Ibn Sahl fue capaz de trazar el camino de los rayos refractados por lentes, tanto esféricas como no esféricas, y fue también capaz de diseñar lentes sin la llamada “aberración esférica”, abriendo un campo de conocimiento conocido ahora como: la óptica de las lentes anaclásticas.

Las lentes esféricas concentran los rayos incidentes, paralelos y cercanos a su eje, en un punto llamado foco, pero los rayos paralelos alejados del eje, ya no se concentran en un sólo punto, sino en una zona alrededor del foco; a esto se le llama “aberración esférica”. Sin embargo, esta aberración puede corregirse con un diseño de lente no-esférica, como la que aparece en la parte inferior de la figura 14.2 en el tratado de Ibn Sahl. Por todo esto, se considera que Ibn Sahl es el primero en formular correctamente la ley de refracción, aunque no la escribe en términos matemáticos, y es también quien inicia el estudio de las lentes anaclásticas, haciendo un uso magistral de la ley de refracción. Más aún, su obra es el antecedente directo del Libro de óptica (*Kitab al-Manazir*) en siete volúmenes, escrito por al-Haytham (castellanizado Alhazén) unos treinta años más tarde. Por esta obra, Alhazén es

considerado el “Padre de la óptica”, obra que fue conocida en Europa en el siglo XII o tal vez XIII, a través de una traducción anónima al latín bajo el nombre *De Aspectibus*. Esta obra fue impresa y publicada muchos años más tarde por Friederich Risner, en 1572, bajo el nombre *Opticae Thesaurus: Alhazeni Arabis libri septem, nunc primum editi; Eiusdem liber De Crepusculis et nubium ascensionibus* (Tesoro en óptica: Los siete libros del árabe Alhazén publicados por primera vez. El libro de los atardeceres, las nubes y las ascensiones).

#### EL EXPERIMENTO

Con la publicación del *Opticae Thesaurus*, pasan a la Europa del siglo XVI y XVII, las invaluable contribuciones a la óptica realizadas en el Islam de los siglos X y XI, y uno se preguntaría ¿porqué la ley de la refracción no lleva el nombre de Ibn Sahl, y se conoce más bien como la ley de Snell?, aunque en Francia se conoce como la ley de Descartes (*la loi de Descartes*) o con cierta condescendencia la ley de Snell-Descartes. En 1621, el astrónomo holandés Willebrord Snel van Rojen reproduce las mediciones de Ptolomeo, pero ahora realizadas con mucho más precisión y postula la ley de refracción como la generalización de un resultado experimental, y que es matemáticamente equivalente a la formulada en términos de las funciones seno. Sin embargo Snel no publica sus resultados, y éstos se reportan 57 años más tarde, dentro de la obra *Traité de la Lumiere* de Christian Huygens en 1678, en donde se hace referencia a ellos, en conexión al comportamiento ondulatorio de la luz en presencia de una interfaz. De aquí el origen del nombre ley de Snell, que por alguna razón que desconozco, se escribe con dos eles.

Es curioso que antes de Snell, alrededor de 1602, al astrónomo inglés Thomas Harriot, se le escapó decir que él conocía la ley de refracción, pero cuando Johannes Kepler se la pidió, éste no se la dio a conocer argumentando problemas de salud. Cansado de esperar a Harriot, Kepler trató de obtenerla él mismo y descubrió que para los rayos paraxiales —aquellos paralelos y cercanos al eje de la lente—, los ángulos de incidencia y refracción eran simplemente proporcionales entre sí, y en donde la constante de proporcionalidad dependía del poder refractor de la lente. Kepler investigó ampliamente las propiedades de reflexión y refracción de superficies, tales como espejos y lentes, pero obviamente no pudo llegar muy lejos debido a que no tenía la ley de refracción correcta.

## EL RAZONAMIENTO

Hay que hacer notar, que en todo este relato sobre la búsqueda de la ley de refracción, ésta se realiza sin saber siquiera que es la luz; por un lado se realizan mediciones, y de esas mediciones se trata de postular una ley de refracción, tal es el caso de Ptolomeo y Snell; por otro lado, se acepta el poder refractor de la materia y se encuentra una solución geométrica para trazar los rayos refractados, tal es el caso de Ibn Sahl. Sin embargo, otra actitud muy diferente frente a la ley de refracción, se debe al brillante matemático y filósofo René Descartes, que se propone deducir la ley de refracción a partir de ideas muy específicas sobre el comportamiento de la luz en medios materiales. Es muy posible que Descartes no haya leído ni a Ibn Sahl, ni a Alahzén, ya que afirma en su afamado ensayo *Dióptrica*, que muchos de los grandes inventos ópticos tan útiles y admirables como el telescopio, hayan sido contruidos basándose sólo "... en el experimento y la buena suerte..." agregando después "... y no conozco a ninguno que haya determinado (en estos aparatos) la forma que la lentes deban tener...", desconociendo, obviamente que este problema había sido tratado profusamente por Ibn Sahl.

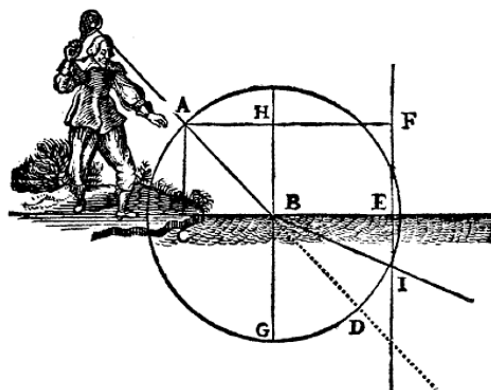
En 1637 se publica en Leiden, en francés, la obra seminal de René Descartes: *El Discurso del Método para conducir bien la razón y buscar la verdad en las ciencias*, el cual estaba estructurado como un prólogo a tres ensayos filosóficos intitulados: *Dióptrica*, *Meteoros* y *Geometría*. En *Dióptrica* Descartes vierte sus ideas sobre la naturaleza de la luz y formula en detalle la ley de refracción. Comienza diciendo, que para conocer como los rayos de luz son deflectados por los distintos objetos que encuentran a su paso, no es necesario conocer la naturaleza misma de la luz; sin embargo añade después, que para él, la luz es en un cierto tipo de "movimiento" o de "acción" muy rápida e intensa, producida por los objetos luminosos, y que viaja hasta nuestros ojos a través del aire y demás objetos transparentes, de forma casi "instantánea". Esto podría interpretarse como una sugerencia a que la velocidad de la luz fuera infinita; sin embargo, esto no es realmente muy importante, ya que en su enfoque trata de no utilizar un modelo concreto sobre la naturaleza de este "movimiento" o de esta "acción".

La hipótesis fundamental de Descartes, es la de suponer que ese "movimiento", que él identifica como luz, sigue las mismas leyes que el movimiento de los objetos comunes, y pone como ejemplo el de las pelotas de tenis; aunque las leyes de movimiento de un rayo de luz podría considerarse similar al de un conjunto de pequeñas pelotas, pero desprovistas de

masa y forma específica, Descartes nunca se compromete a afirmar que la luz está constituida por un conjunto de pequeños corpúsculos. Su razonamiento para deducir la ley de refracción se apoya en la figura 14.3 que aparece en su *Dióptrica*, en donde alguien (un caballero con una raqueta de tenis) lanza la pelota en  $A$ , en la dirección de  $B$ , y ese movimiento a lo largo de  $AB$ , Descartes lo descompone en dos movimientos: uno de descenso  $AC$  y otro de izquierda a derecha paralelo a la interfaz, a lo largo de  $AH$ . Es importante hacer notar, que esta descomposición del “movimiento” que ahora nos parece tan natural, dado que corresponde a considerar el movimiento como un vector, no era del todo aceptada en tiempos de Descartes. Supone además, que las pelotas pueden penetrar la interfaz  $CBE$  del aire a un cierto material, pero que al hacerlo pierden algo de su velocidad, digamos la mitad. Ahora bien, la presencia de la interfaz debe modificar sólo la componente del movimiento perpendicular a la interfaz (la de descenso), ya que la presencia del material no se opone a la componente del movimiento paralela a la interfaz. Por lo tanto, para llegar a un punto sobre la parte inferior del círculo  $AGE$ , la pelota tardará el doble de tiempo, ya que su velocidad fue reducida a la mitad. Pero la componente paralela del movimiento no fue alterada por la presencia del material, por tanto la distancia paralela  $HF$  que recorre la pelota en el doble del tiempo, debe ser el doble de la distancia paralela  $AH$ , que recorrió la pelota antes de penetrar en el material; y dado que en la dirección de refracción, la distancia recorrida por la componente paralela del movimiento debe ser igual a  $HF$ , la dirección de refracción debe estar dada por  $BI$ , en donde  $I$  es la intersección de la recta perpendicular  $EF$  con el círculo  $AGE$ .

Después de esta demostración, enteramente mecánica, Descartes argumenta que la luz debe tener un comportamiento similar al de las pelotas, es decir, que debe seguir las mismas leyes de movimiento; no dice que la luz sea un conjunto de pelotitas, pero lo que sí dice, es que las leyes de movimiento de los rayos luminosos deben ser las mismas que la de los objetos comunes (pelotas). En el caso de la luz, el poder refractor estaría dado por la razón  $AH/HF$ , y la ley de refracción establecería que esta razón debe ser la misma para cualquier ángulo de incidencia. Es importante hacer notar que  $AH/HF$  es igual al cociente del seno del ángulo de incidencia entre el seno del ángulo de refracción, por lo que Descartes es considerado, en el mundo francófono, el descubridor de la ley de refracción.

Sin embargo, Descartes es muy consciente de que su deducción tiene un problema, y lo manifiesta claramente advirtiendo al lector, que en los experimentos con rayos de luz en la interfaz aire-agua, la dirección de la



**Figura 14.3:** Figura que aparece en el ensayo de Descartes, *Dióptrica*, en donde un caballero lanza, con una raqueta de tenis una pelota a la interfaz CBE entre dos medios.

luz refractada, con relación a la dirección de incidencia, se aproxima más a la normal; y el problema aparece, porque en sus deducción con las pelotas, la dirección de la pelota refractada se aleja de la normal en vez de acercarse, tal y como se ve en la figura 14.3. Para que en el caso de las pelotas, la dirección de refracción se acerque más a la normal en vez de alejarse, las pelotas deberían de adquirir una velocidad adicional al penetrar en el material, es decir, deberían ir más rápido dentro del material, que en el aire. Este es el mismo problema que tuvo Isaac Newton 35 años más tarde, cuando propuso, ahora sí, un modelo corpuscular de luz, que para explicar la ley de refracción exigía que los corpúsculos luminosos, como las pelotas, deberían ir más rápido dentro del agua, que en el aire. Esta dificultad se hizo más evidente cuando se mostró, más tarde, que la luz tenía una velocidad finita de propagación, y que su velocidad de propagación en los medios materiales era siempre menor que en el vacío.

Por cierto, Descartes no proponía que la luz estuviera constituida por corpúsculos viajando a una cierta velocidad, sino pensaba más bien, que cuando un rayo de luz incide en un material, éste lo “recibe” con mayor o menor “dificultad”, comparado con la “dificultad” que le presenta, al transmitirse, el material por donde incide. Es más, él pensaba que la luz era un “movimiento” —una “acción”—, y que está “acción” era recibida por un material muy tenue que llenaba los poros de todos los cuerpos, y así como una pelota pierde más su poder de movimiento al correr sobre un cuerpo

suave y blando, que sobre uno macizo y duro; de igual forma, la transmisión de la “acción” de este material sutil debe presentar un mayor impedimento a través del aire, cuyas partes están muy débilmente unidas, que a través del agua o del vidrio, cuyas partes son más duras y firmes, concluyendo así, que para la luz será mucho más fácil transmitirse a través del vidrio que a través del aire. Con estas ideas sobre el comportamiento de la luz, y con conceptos no definidos con claridad, como la “facilidad” o “dificultad” en la transmisión de la “acción” luminosa, Descartes trata de justificar y de convencer al lector, de que en el caso de la luz, la dirección del rayo refractado en un medio más denso se acerca a la normal en vez de alejarse, lo que es un hecho. Es muy claro que Descartes, al no introducir el concepto de una velocidad finita de la luz —que sería lo análogo a la velocidad de las pelotas—, evita las dificultades del modelo corpuscular, pero a cambio de introducir conceptos poco claros, confusos, y no definidos con precisión, que ponen en duda la validez de su razonamiento.

#### LOS CAMINOS EXTREMOS

Uno de los críticos más severos de la deducción de la ley de refracción realizada por Descartes, fue el abogado de formación y brillante matemático francés Pierre de Fermat. Aunque Fermat no publicó sus trabajos, éstos fueron dados a conocer a través de terceros, y es considerado una de las mentes matemáticas más lúcidas del siglo XVII, rivalizando con el propio Descartes. Existen evidencias de un largo y tormentoso debate entre Fermat y Descartes sobre la ley de refracción, un debate epistolar con agudos argumentos físicos y observaciones de carácter matemático, la más de las veces salpicados de una ácida ironía. En 1637, cuando Descartes manda a publicación su obra maestra sobre el comportamiento de la luz, *Dióptrica*, una copia de ese manuscrito fue entregado al Sr. Beaugrand, secretario del Rey y encargado de aprobar las publicaciones, y éste lo circuló entre distintas personalidades, siendo una de ellas Pierre de Fermat; el cuál después de leerla y examinarla, le manda, en septiembre de 1637, sus opiniones sobre el manuscrito al reverendo Marin Mersenne, quien sirvió de contacto “puente” entre Descartes y Fermat. Mersenne era un teólogo y prestigiado matemático francés, conocido entre los matemáticos por sus trabajos en teoría de números, en especial, los llamados números primos de Mersenne; era además un respetable difusor de las ideas y los descubrimientos de distintas personalidades de la época, y mediador en diversas disputas académicas, promoviendo también los trabajos de Galileo y Descartes y teniendo una

relación epistolar con Christian Huygens y Pierre de Fermat, entre otros.

En esa carta, Fermat menciona el trabajo de Alhazén, sin darle mucha importancia, y apunta una serie de objeciones sobre la línea de razonamiento seguida por Descartes, para deducir la ley de refracción. Después critica la idea de considerar a la luz como un “movimiento” y aducir que cualquier “tendencia” al movimiento, debe seguir las leyes de movimiento que siguen, por ejemplo, las pelotas de tenis. Continúa con una serie de objeciones, de las que aquí sólo menciono dos de ellas, que son las que me parecen más agudas:

- 1) Refiriéndose a la descomposición del movimiento (de las pelotas), propuesto por Descartes, en dos componentes simultáneas, una paralela y otra perpendicular a la interfaz, Fermat alega que esa descomposición no es la única posible, que esa descomposición podría también realizarse en una multitud de otras parejas de direcciones, y que Descartes las escoge así, porque sólo así puede obtener el resultado que desea.
- 2) Fermat no acepta la idea de que las pelotas, cuando entran al segundo medio, conservan el movimiento de la componente paralela que tenían en el primer medio (medio de incidencia). Alega, que si el segundo medio es isótropo y homogéneo, no hay razón alguna para suponer que las dos componentes del movimiento en ese medio, tengan velocidades diferentes.

Además de las cartas que Descartes y Fermat intercambian a través de Mersenne, después de la circulación del manuscrito de la *Dióptrica* en 1637, existe otra correspondencia entre el editor de las obras de Descartes, Claude Clerselier, y Fermat, en 1658, después de la muerte de Descartes en Suecia (1650). En esta correspondencia, Clerselier argumenta en favor de los razonamientos de Descartes y Fermat revive y vuelve a fundamentar sus objeciones. Sin embargo, creo que en donde las objeciones de Fermat están más claramente expresadas, es en la sección IX de su obra seminal: Método para el estudio de máximos y mínimos (*Methodus ad disquirendam maximam et minimam*) escrita originalmente en latín. En esta sección Fermat acepta que la ley de refracción propuesta por Descartes es, al parecer, correcta y que además es congruente con el experimento. Sin embargo agrega, que para deducir esta ley, Descartes tuvo que suponer que la luz viaja más fácilmente y más rápidamente en medios densos que en medios poco densos, y que eso es contrario a la luz de la razón. Pero reconociendo que la luz tiene una



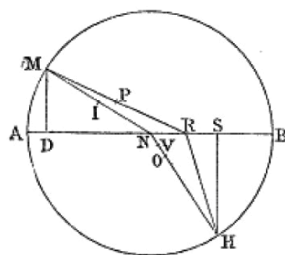
velocidad finita de propagación y suponiendo ahora lo contrario, o sea, que la luz viaja más rápidamente en los medios poco densos que en los medios densos, Fermat prueba, en la sección VIII de su obra, que es posible llegar a la misma ley de refracción, y se pregunta perplejo si esto es lógicamente posible ¿llegar a la misma ley de refracción con suposiciones opuestas?

Para probarlo, Fermat utiliza su método de máximos y mínimos introduciendo un nuevo principio, que había comenzado a razonar en sus discusiones con Marin Cureau de la Chambre, el cual mostraba en su libro *La Luz*, que la ley de reflexión podía deducirse suponiendo que para ir de un punto a otro, un rayo de luz optaba por elegir el camino más corto. Sin embargo, Fermat pensaba que cuando el tiempo entra en acción, y cuando se acepta que la luz se propaga con velocidades distintas en distintos medios, el rayo elige, no el camino más corto sino el camino más rápido, o sea, el camino en el que tarda el menor tiempo posible. Esto le parecía a Fermat “lo más natural”.

Su método de máximos y mínimos está formulado de la siguiente manera: Si se tiene una función  $f(a)$  y se quiere obtener el valor de  $a$  para la cual  $f(a)$  tiene un valor extremo —máximo o mínimo— se sustituye en la función en vez de  $a$ ,  $a + e$ , es decir, se calcula  $f(a + e)$  y después se calcula  $[f(a + e) - f(a)]/e$  tomando finalmente  $e = 0$ . Cuando esta expresión se iguala a  $f(a)$  se obtiene una ecuación para  $a$  que corresponde al valor de  $a$  para el cual la función  $f(a)$  tiene un valor extremo. Como vemos, este método está incrustado dentro de la corriente de pensamiento que en esos tiempos se llamaba, la matemática de los “infinitesimales”, en la cual todavía no aparecía el concepto de límite, y era considerada poco fiable para algunos respetables matemáticos, entre ellos Descartes. Si se introdujera el concepto de límite en el método de Fermat, éste correspondería simplemente a afirmar, lo que ahora aparece en cualquier libro elemental de cálculo, que los valores extremos de la función  $f(a)$  están dados por la ecuación  $f'(a) = 0$ , en donde  $f'(a)$  es la derivada de  $f$  con respecto a  $a$ .

Si vemos ahora la figura 14.4, que aparece en el tratado de Fermat sobre máximos y mínimos, en esta figura  $AB$  representa la interfaz entre dos medios en donde la luz viaja a velocidades diferentes y  $MHN$  representa el camino de un rayo de luz, que partiendo del punto  $M$  llega a la interfaz en  $N$  y viaja en el otro medio con dirección  $NH$ ; y Fermat se pregunta ¿cuál debe ser la posición del punto  $N$  para que el tiempo que tarda un rayo de luz en recorrer el camino  $MNH$  sea el mínimo? Con su método Fermat realiza los cálculos pertinentes, que se muestran en detalle en la sección VIII de su obra, y concluye que para que un rayo de luz recorra el camino  $MHN$

en el tiempo más corto, la razón de los senos de los ángulos de incidencia y refracción, debe ser la misma que la razón de las velocidades de la luz en los dos medios. Este resultado le emociona, pero le sorprende llegar —en 1662— a la misma fórmula obtenida por Descartes 25 años antes. En una carta escrita a de la Chambre, ese mismo año, en donde Fermat le comunica su resultado, agrega un comentario en donde compara el “descubrimiento” de Descartes, a la rendición de una plaza fortificada basada únicamente en la reputación del jefe enemigo: La Naturaleza ha rendido sus principios ante Descartes, sin haber sido forzada siquiera por demostración alguna: ¡tal era la reputación del Sr. Descartes! Este comentario nos muestra, de alguna manera, el sentir de Fermat ante una fórmula de la cual inicialmente había desconfiado y criticado incisivamente, y de todas las vicisitudes que tuvo que pasar para llegar finalmente... a la misma fórmula.



**Figura 14.4:** Figura que aparece en la obra de Fermat.  $AB$  representa la interfaz y  $MNH$  es el camino del rayo de luz.

#### COMENTARIO FINAL

Aquí quisiera hacer notar la importancia del trabajo de Fermat en relación a la ley de refracción, en donde esta ley se deduce a partir de lo que hoy llamamos un principio variacional. La afirmación de que los rayos de luz toman el camino más rápido, no es del todo obvia, aunque así le pareciese a Fermat. Por otro lado, este principio no requiere de un modelo específico sobre la naturaleza de la luz, lo único que se necesita es aceptar que la luz viaja a una velocidad finita y que viaja más rápido en los medios poco densos que en los medios más densos; sin necesidad de saber realmente que es la luz. Ahora, dado que las mediciones y los experimentos nos han mostrado que los supuestos utilizados para postular el principio del camino más rápido —principio de Fermat— son correctos, es forzoso aceptar que el principio es también correcto: los rayos de luz se van por el camino más

rápido... siempre. Esta manera de formular las leyes de la física, es una forma diferente de hacer física, ya no se escriben las ecuaciones explícitas adecuadas a diversas situaciones, sino que se declara un principio muy general, a partir del cual se pueden generar las ecuaciones que deben seguir el camino de los rayos de luz en todas las circunstancias posibles. Se enuncia un principio —el principio de Fermat— y ya no se habla de la ley de refracción o de la ley de reflexión, ya no se especifica la geometría de una lente o de un espejo, lo que se afirma es que los rayos de luz siempre “escogerán” irse por el camino más rápido... punto.

Sin embargo, al decir que los rayos de luz “escogerán” irse por el camino más rápido, suena como si los rayos ya “supieran” a donde tienen que llegar, o como si una inteligencia “superior” los guiara para irse por el camino más rápido, sabiendo de antemano a donde deben llegar. En física, a esto se le llama una formulación de causa final, que se contrapone a la formulación de causa inicial, en donde se especifican la causa y las condiciones iniciales y las ecuaciones dinámicas hacen que el sistema evolucione en el tiempo y llegue así a su estado final. En mecánica existe también un principio variacional —el principio de mínima acción— que, de manera análoga al principio de Fermat, es una formulación de causa final, que da sin embargo los mismos resultados que los obtenidos con las ecuaciones de Newton, que son una formulación de causa inicial; por lo tanto corresponde al lector escoger la formulación que más le agrade, o la que esté más de acuerdo con sus principios o sus prejuicios filosóficos.

Habría que agregar también, que cuando Descartes se refería de manera imprecisa al “movimiento” o a la “acción”, era en realidad lo que hoy llamamos cantidad de movimiento o momento lineal, una cantidad vectorial que hoy sabemos se puede descomponer, de muchas maneras, en dos componentes; por lo tanto, hay que reconocer la gran intuición de Descartes para descomponer, lo que él llamaba “acción”, en una componente paralela a la interfaz y otra perpendicular, y que le haya parecido “natural” que la componente paralela no cambiara al cruzar la interfaz. Hoy es claro para nosotros, que lo que estaba detrás de su penetrante intuición, era precisamente la ley de conservación del momento lineal, y que esta ley de conservación es una suposición adicional, que parte necesariamente de la experiencia y no del razonamiento puro como él trataba inútilmente de probar. Cabe añadir, sin embargo, que ahora somos capaces de deducir las leyes de conservación a partir de argumentos de simetría del hamiltoniano, podríamos decir entonces... que tal vez Descartes tenía razón.

## GLOSARIO.

- **Ángulo de incidencia:** el ángulo que forma la dirección del rayo incidente con la normal a la interfaz.
- **Ángulo de refracción:** el ángulo que forma la dirección del rayo refractado con la normal a la interfaz.
- **Índice de refracción:** el cociente de la velocidad de la luz en el vacío sobre la velocidad de la luz en el medio material.
- **Interfaz:** la frontera entre dos medios distintos
- **Reflexión:** cambio de dirección de los rayos de luz cuando se encuentran con una superficie lisa como la de un espejo.
- **Refracción:** cambio de dirección de los rayos de luz cuando atraviesan la interfaz entre dos medios transparentes diferentes.

## PARA SABER MÁS:

- [\*Refraction: A History - LaRouchePAC.\*](#)
- [\*Method for the study of maxima and minima by Pierre de Fermat\*](#)
- Kwan, A., Dudley, J., Lanz, E., *Who really discovered Snell's law?*, Physics World, Vol. 15, Num. 4 (2002) p. 64
- Schuster, J. A., *Descartes Opticien: The Construction of the Law of Refraction and the Manufacture of its Physical Rationales 1618-1629*, Gaukroger, S., J. Schuster. and Sutton, J., Descartes' Natural Philosophy (2000); pp.258-312.

## REFERENCIAS

- [1] R. Rashed, «A Pioneer in Anaclastics: Ibn Sahl on Burning Mirrors and Lenses», *Isis*, vol. 81, n.º 3, págs. 464-491, 1990.

## ¿POR QUÉ EL TROMPO QUE GIRA NO SE CAE?

Jorge Flores Valdés\*

El trompo es un juguete fascinante y a cualquier niño le ha costado mucho esfuerzo hacerlo bailar girando sobre el piso. ¿Por qué no se cae el trompo al girar, como sí lo hace un trompo estático? ¿Por qué la fuerza de gravedad no causa la caída del trompo que gira? Veremos en este capítulo que la mejor respuesta a estas preguntas es otra en apariencia paradójica: ¿por qué el trompo no se levanta? Empezamos por discutir el problema de una polea que gira montada sobre una placa a su vez giratoria. Este problema es más fácil de entender que el del trompo pesado y abre el camino para una discusión cualitativa del movimiento de los trompos.

En muchos textos de mecánica, como los tres primeros que se enlistan en la sección **Para saber más**, se trata el problema del trompo pesado. Sin embargo, el ataque de este problema se hace desde un punto de vista formal, y la física queda más bien oculta. Por eso, en el libro *Dinámica del cuerpo rígido* hemos tratado este y otros problemas de la física de rotaciones desde un punto de vista cualitativo. Esto haremos a continuación.

En la figura 15.1 mostramos una polea con precesión controlada. Colocamos una polea de masa  $M$  y momento de inercia  $I_3$  que gira con una velocidad angular constante  $\dot{\psi} = \omega$  respecto a su eje. Éste se coloca sobre dos soportes  $A$  y  $B$  montados en una plataforma  $P$  que gira a su vez con una velocidad angular  $\dot{\phi} = \Omega$ , también constante. Nos interesa evaluar las fuerzas  $F_A$  y  $F_B$  que los soportes ejercen en el sistema. Consideremos primero el caso en que la polea no gira. Por simetría, en este caso  $F_A = F_B = Mg/2$ . Cuando tanto  $\omega$  como  $\Omega$  son distintas de cero, la fuerza en  $B$  aumenta y se convierte en  $F_B = Mg/2 + F$  mientras que  $F_A$  disminuye y vale  $Mg/2 - F$ . El momento angular a lo largo del eje es  $I_3\omega$  y su cambio es proporcional a

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

$\Omega$ . La torca producida por  $F$  es igual a  $Fb$  y debe ser proporcional a  $I_3\omega\Omega$ . De hecho, obtenemos

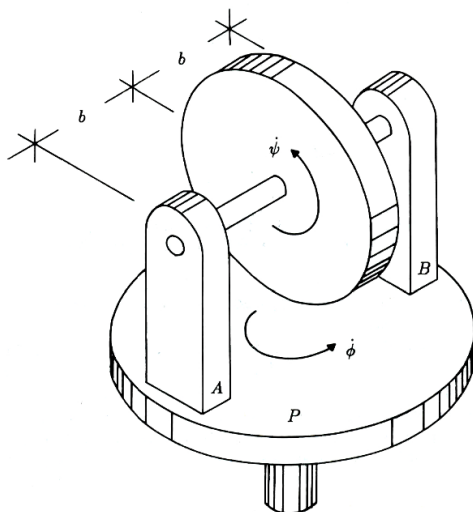
$$F_A = \frac{1}{2} \left( Mg - \frac{I_3\omega\Omega}{b} \right),$$

que se anula para un valor crítico  $\Omega_c$  de la velocidad angular de la plataforma dado por

$$\Omega_c = \frac{Mgb}{I_3\omega},$$

y entonces ¡el soporte  $A$  no es necesario!

Hemos obtenido un resultado en apariencia contradictorio: el cuerpo que gira no cae bajo el efecto de su peso; lo que sucede en realidad es lo contrario, pues precisamente su peso impide que siguiendo la inercia de sus partículas el cuerpo suba, como lo haría si estuviera libre. Más aún, si  $\Omega > \Omega_c$ ,  $F_A$  se vuelve negativa y en ausencia del soporte  $A$  el cilindro se levantaría. La fuerza  $F_B$  es ahora mayor que el peso y es la que levanta a la polea.



**Figura 15.1:** Una polea de radio  $h$  montada en una plataforma giratoria  $P$ .

#### EL TROMPO PESADO CON UN PUNTO FIJO

Consideremos un trompo simétrico, con  $I_1 = I_2$ , en un campo gravitacional y con la punta de su eje fija en el espacio como se muestra en la figura

15.2. En este esquema se muestran los ángulos de Euler  $\phi, \theta, \psi$ , que son las coordenadas generalizadas que emplearemos. Tomemos primero en cuenta las simetrías que presenta este problema. Como ya dijimos, el trompo es simétrico respecto al eje  $X_3$ : nada cambia si la coordenada  $\psi$  se altera. También es invariante el sistema frente a rotaciones respecto a un eje vertical y la coordenada  $\phi$  puede tomar un valor arbitrario que no importa. Estas simetrías nos llevan a dos componentes del momento angular  $l_z$  y  $l_3$  que se conservan, lo que también puede verse de las torcas que actúan sobre el trompo: la fuerza de constricción del piso no produce torca y la fuerza de gravedad causa torcas que son perpendiculares a la vertical y al eje del trompo. Vemos además que la energía total se conserva.

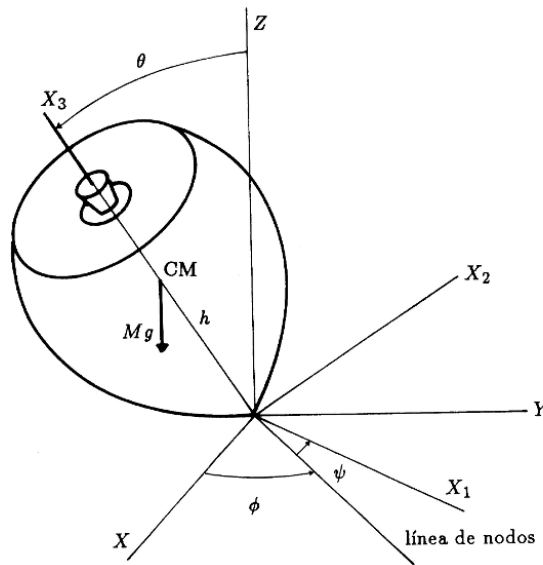


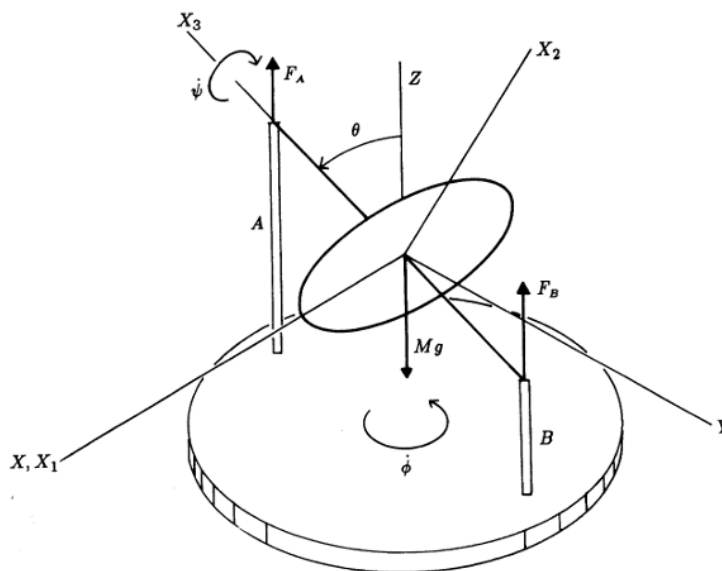
Figura 15.2: Coordenadas de un trompo pesado con un punto fijo.

El sistema de rotación controlada, que se muestra en la figura 15.3 se parece ya bastante al trompo sobre el piso con un punto fijo. Si  $\theta \neq 0$ , es fácil calcular  $F_A$ , la fuerza que ejerce el soporte A:

$$2F_A = \frac{I_1 \cos \theta}{h} \dot{\phi}^2 - \frac{I_3 \omega_3}{h} \dot{\phi} + Mg$$

y cuando  $\theta$  no se altera, tenemos un ejemplo de movimiento estacionario. Vemos que para  $\theta = \pi/2$ , esta fórmula se reduce a la que antes obtuvimos para  $F_A$ . Si ahora elegimos  $\dot{\phi}$  y  $\dot{\psi}$  tales que  $F_A = 0$ , ¡estamos frente a un

trompo en precesión regular! El trompo no se cae porque la inercia de sus partículas en movimiento tiende a levantarlo, tendencia que se ve contrarrestada, exactamente, por su propio peso.



**Figura 15.3:** La polea gira alrededor de un eje inclinado que también gira.

Pensemos ahora en un trompo simétrico colocado en el piso y que gira sobre su eje con una velocidad angular  $\omega_3$ . El eje del trompo inicialmente forma un ángulo  $\theta_1$  respecto a la vertical y su centro de masa está en reposo, con  $\dot{\phi} = 0$ . Cuando el trompo se suelta, el centro de masa empieza a caer, el eje  $X_3$  se inclina más, el ángulo  $\theta$  aumenta y se gana energía cinética del centro de masa. El trompo no se puede inclinar impunemente, pues  $l_3$  y  $l_z$  deben permanecer constantes. La única posibilidad es que el cuerpo adquiera una componente adicional  $l_2$  en la dirección  $X_2$ , como se ve en la figura 15.4. Esto significa que aparece una nueva componente  $\omega_2$  en la velocidad angular que, proyectada sobre el eje vertical, se convierte en la velocidad de precesión  $\phi$ . ¡Cuando el trompo cae, precede!

¿Puede seguirse compensando indefinidamente la componente vertical del momento angular  $l$ , a medida que el cuerpo cae? La respuesta es no. La fuerza  $F_B$  que ejerce el soporte  $B$  (o el suelo) aumenta con la velocidad de precesión y puede incluso superar a  $Mg$ , detener la caída del trompo, y luego hacerlo subir. He aquí el movimiento de nutación. El razonamiento es más claro cuando  $\omega_3 \rightarrow \infty$ , el caso del trompo muy rápido, donde se



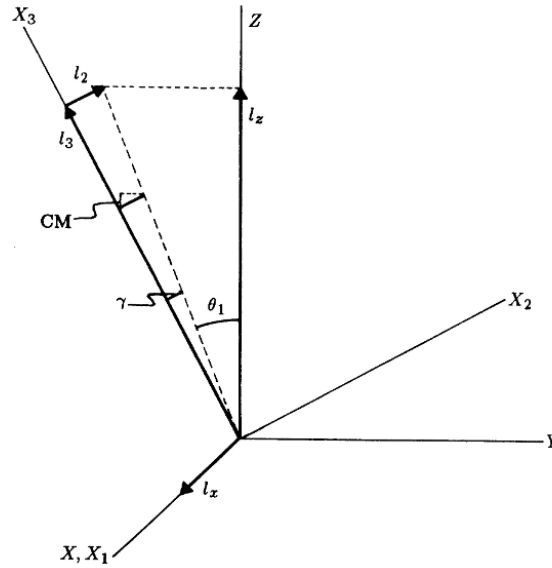


Figura 15.4: Se genera la componente  $l_2$  para que  $l_z$  no disminuya.

ilustra con claridad el uso de los casos límite.

#### EL TROMPO RÁPIDO SE DUERME

Diremos que el trompo es rápido cuando la energía cinética de rotación respecto a su eje de simetría es mucho mayor que la energía potencial disponible:

$$\eta = (1/2) I_3 \omega_3^2 / 2Mgh \gg 1.$$

Cuando el trompo parte con su eje en reposo con  $l_3$  muy grande e inclinado con  $\theta = \theta_1$ , la amplitud de la nutación es muy pequeña. En efecto, al inclinarse más el eje disminuye mucho la componente vertical de  $l$  y para compensar este decrecimiento se requiere una velocidad de precesión  $\dot{\phi}$  comparable a  $\omega_3$ . Pero ya que  $\eta \gg 1$ , el campo gravitacional no puede proveer la energía necesaria. En conclusión: mientras mayor sea  $\omega_3$  menor es la amplitud de nutación. Vamos ya acercándonos al trompo dormido.

Ya que  $\theta \simeq \theta_1$ , usemos como nueva coordenada  $\gamma = \theta - \theta_1$  que es siempre mucho menor que  $\theta_1$ . Como la componente  $l_2$ , que se ve en la figura 15.4, se confunde entonces con el arco,  $l_2 = \gamma l_3$ . Si  $T_i = l_i^2 / 2I_i$ , el término con  $i = 3$  es constante y puede eliminarse del lagrangiano. Así convertimos el problema en otro con sólo  $\gamma$  como coordenada independiente. Ya que

$T_2 = l_3^2 \gamma^2 / 2I_1$  y el cambio en energía potencial es proporcional a  $\gamma$ , vemos que  $\gamma$  obedece la ecuación del oscilador armónico, cuya solución es

$$\gamma = \frac{\gamma_m}{2} (1 - \Omega), \quad \gamma_m = \frac{I_1 \sin \theta_1}{2I_3 \eta}, \quad \Omega = \left( \frac{I_3}{I_1} \right) \omega_3.$$

Si eliminamos el caso de un cuerpo en forma de puro ( $I_3 \ll I_1$ ), vemos que cuando  $\omega_3$  aumenta no sólo decrece la amplitud de la nutación sino también la frecuencia de ésta aumenta. Nótese que  $\Omega \neq 0$  aun para  $g = 0$ , así que hemos explicado de paso el cabeceo del trompo libre.

Sabemos pues qué ocurre con la nutación, pero ¿qué pasa con el movimiento de precesión? Otra vez de la relación

$$l_2 = I_1 \omega_2 = I_1 \dot{\phi} \sin \theta_1 = l_3 \gamma = I_3 \omega_3 \gamma,$$

es muy sencillo obtener que el promedio temporal  $\overline{\dot{\phi}}$  de  $\dot{\phi}$  es

$$\overline{\dot{\phi}} = \frac{Mgh}{I_3 \omega_3},$$

que es pequeña cuando el trompo es rápido. De hecho, esta conclusión es inevitable pues ya que la amplitud de nutación es pequeña para el caso límite  $\omega_3 \gg 1$ , la energía disponible para la precesión también lo es. El trompo parece estar dormido.

#### LA NUTACIÓN COMO PERTURBACIÓN DEL TROMPO DORMIDO

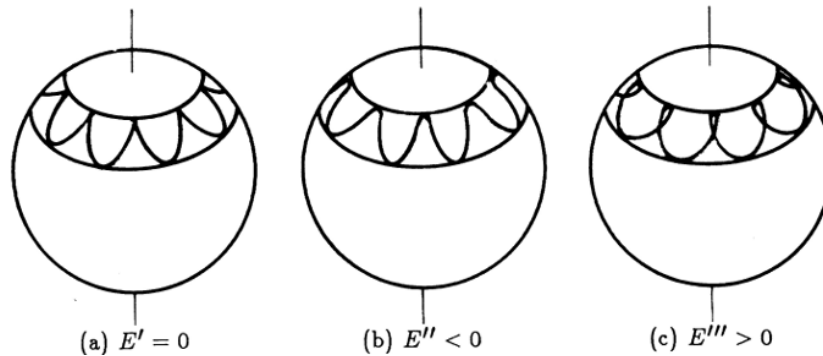
Es posible obtener la forma general de las ecuaciones del movimiento oscilatorio respecto al estacionario. Las ecuaciones toman la forma

$$\sum_{\beta=1}^{n_1} (a_{\alpha\beta} \ddot{x}_\beta + b_{\alpha\beta} \dot{x}_\beta - c_{\alpha\beta} x_\beta) = 0, \quad \alpha = 1, \dots, n_1$$

que difieren de las de oscilaciones pequeñas respecto al equilibrio por la presencia de los términos proporcionales a  $\dot{x}$ , que se llaman términos giroscópicos. En el caso del trompo simétrico estos términos no aparecen.

Regresando al trompo rápido, lo encontramos en precesión regular con  $\theta_0 = \theta_1 + \gamma_m/2$ . Ahora le comunicamos un impulso que cambie  $\theta$  sin alterar  $l_3$  y  $l_z$ , pero que le agregue al trompo la energía  $T_1$ :  $\phi$  se anula y en el punto de retorno más alto no hay precesión. Si el impulso es menor, la energía total es negativa,  $T_2$  no se anula y la precesión continúa. Algo inesperado ocurre

si elevamos la energía total hasta un valor positivo. El ángulo  $\theta$  cruza el valor  $\theta_1$  pero sigue disminuyendo hasta llegar a un valor donde la nutación se anula pero donde  $T_2 \neq 0$ . Las leyes de conservación del momento angular exigen ahora una  $l_2$  negativa: ¡el trompo precede hacia atrás! Las tres situaciones se muestran en la figura 15.5, que es válida en general, como se puede constatar en los tratamientos analíticos de los libros de texto.

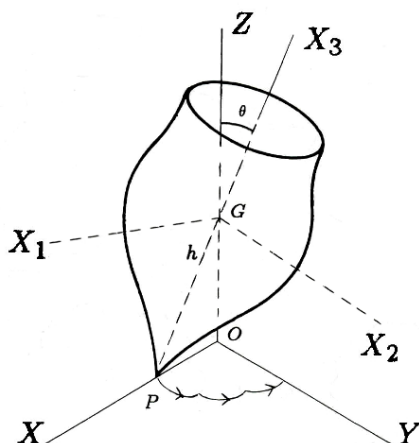


**Figura 15.5:** Trazo que deja el eje del trompo sobre una esfera centrada en el punto fijo, para las tres posibilidades de nutación y precesión.

### EL TROMPO SOBRE HIELO

Ahora atacaremos un problema en que se mezclan la rotación y la traslación: la punta del trompo ahora no está fija sino que se mueve en una superficie muy lisa, como si resbalará sobre hielo. La fricción con el piso es nula y el trompo se ve sujeto sólo a dos fuerzas verticales: su peso y la reacción normal producida por el piso. El centro de masa  $G$  sólo puede desplazarse a lo largo de la vertical y con la coordenada  $z = h \cos \theta$  de la figura 15.6 se determina su posición.

Al igual que en el problema del trompo pesado con su punta fija, existen tres cantidades conservadas. Como la fuerza de constricción  $N$  es perpendicular al desplazamiento de la punta, no hace trabajo, y la energía se conserva. Si colocamos el origen de coordenadas fijas en el cuerpo en el punto  $G$ , la torca que  $N$  ejerce es normal al eje de simetría del trompo y a la vertical; otra vez  $l_z$  y  $l_3$  se conservan y los ángulos de Euler  $\phi$  y  $\theta$  no aparecen en la Lagrangiana. Con estas tres leyes de conservación, dedujimos que el trompo precede y nuta. Por tanto, un razonamiento análogo nos permite concluir que el trompo en hielo precede y nuta.



**Figura 15.6:** Traza que deja la punta del trompo al preceder y nutar sobre el hielo.

Para completar el análisis de este problema es conveniente ver la forma en que se mueve la punta del trompo sobre el suelo. Si visualizamos conjuntamente el movimiento del centro de masa, que se mueve verticalmente hacia arriba y hacia abajo siguiendo la nutación, con el movimiento de precesión que incrementa el ángulo  $\phi$ , vemos que la punta del trompo describe sobre el piso una curva como la que se muestra en la figura 15.6. A medida que la velocidad angular del trompo crece, la amplitud de la nutación decrece y su frecuencia aumenta; la traza sobre el piso se acerca cada vez más a un círculo, que en el límite de frecuencias altísimas tiene un radio  $h \sin \theta_1$ , donde  $\theta_1$  es el ángulo respecto a la vertical con el que se soltó el trompo al inicio.

PARA SABER MÁS:

- Goldstein H., Poole C., Safko J., *Classical mechanics*, Addison Wesley, (EUA, 2002)
- José J., Saletan E., *Classical Dynamics*, Cambridge University Press, (EUA, 1998)
- Hestenes D., *New Foundations for Classical Mechanics*, Kluwer Academic Publishers, (Holanda, 1986)
- Flores J., Anaya G., *Dinámica del cuerpo rígido*, Fondo de Cultura Económica, (México, 1989)

## LAS CAPRICIOSAS TRAYECTORIAS DE LAS BOLAS EN EL BILLAR Y EN LOS DEPORTES

*Jorge Flores Valdés\**

Las características de las pelotas varían en los diversos juegos y deportes. En algunos de ellos la superficie de las pelotas presenta rugosidades: el balón tiene gajos (como en el fútbol), la bola presenta costuras (como en el béisbol), u hoyuelos (como en el golf). Cuando estas rugosidades se desaparecen, las pelotas tienen una superficie lisa (por ejemplo, en el billar, el ping-pong y el boliche). En este sentido el movimiento de las pelotas lisas es un caso límite de aquéllas con rugosidades. A continuación, se discuten los diversos movimientos que ejecutan esas pelotas al viajar en el aire o moverse sobre una superficie plana. En todo nuestro análisis consideraremos a las pelotas como un cuerpo rígido, que sólo se desplaza y gira, por lo cual tiene seis grados de libertad.

Los juegos de pelota han fascinado a la humanidad desde hace muchísimos siglos. En mesoamérica, se jugaron desde el año 1400 a. C. y tenían connotaciones rituales. Además, cumplían con la función de resolver conflictos.

Las reglas de este juego de pelota no se conocen del todo, pero a juzgar por su descendiente, el ulama, se trataba de mantener la pelota en juego sin dejarla caer. Los aros de piedra fueron una adición tardía al juego, y se obtenía el triunfo si la pelota se metía en el aro. La pelota estaba hecha de caucho, pesaba 4 kilogramos y su tamaño variaba según diferentes condiciones, entre ellas el rango de los jugadores.

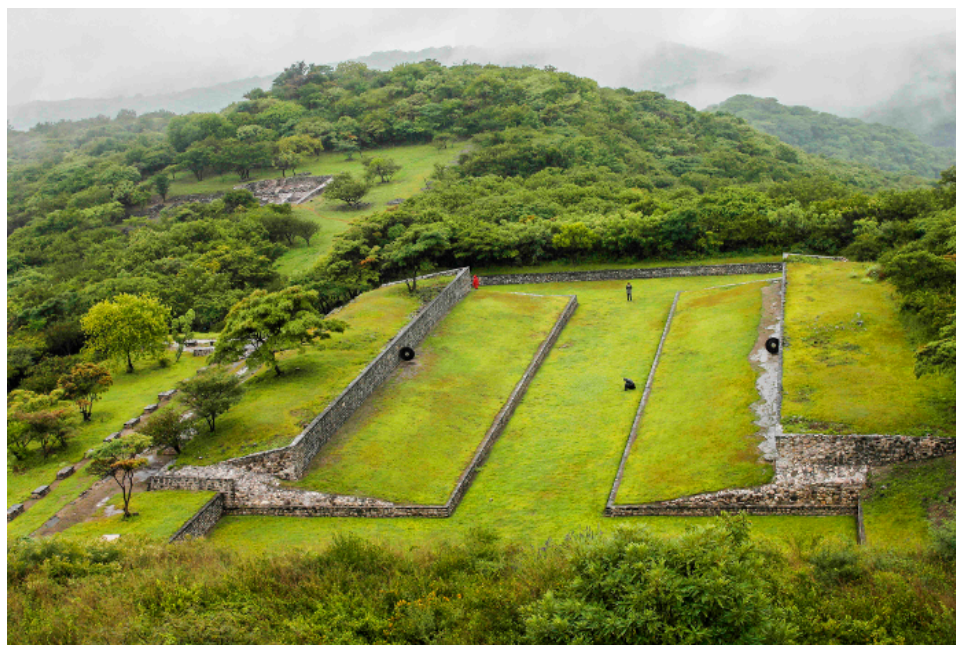
Una lectura obligatoria para todo buen jugador de billar es el libro *Théorie mathématique des effets du jeu de billard* escrito en 1835 por Coriolis, uno de los físicos ilustres en la mecánica clásica. Golpeando con el taco la bola

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

	JUEGO O DEPORTE	CONSTITUCIÓN DE LA BOLA	DIÁMETRO (cm) ( $d/d_{pp}$ )	MASA (gr) ( $m/m_{pp}$ )
BOLA	Ping-pong	Celuloide	$d_{pp} = 4.0$ (1)	$m_{pp} = 2.7$ (1)
	Canica pequeña	Vidrio	1.6 (0.4)	10 (3.7)
	Canica grande	Vidrio	2.5 (0.63)	40 (14.8)
LISA	Boliche	Uretano, plástico, resina	22 (5.5)	7300 (2700)
	Billar	polímeros plásticos termoestables	6.2 (1.55)	160 (60)
BOLA NO LISA	Futbol	Icosaedros truncados	22 (5.5)	430 (160)
	Beisbol	Núcleo de caucho y capas de hilo	7 (1.75)	142 (52.6)
	Tenis	Fieltro con nitrógeno gaseoso	6.7 (1.7)	56 (21)
	Golf	Goma rellena de líquido	4.3 (1.07)	46 (17)
	Basquetbol	Cuero o caucho con 9366 puntos	70 (17.5)	600 (222)
	Jai alai	Núcleo macizo cubierto de hilo	5.5 (1.4)	127 (47)
	Frontenis	Goma maciza	0.45 (0.11)	62 (23)

**Figura 16.1:** Diversidad de las pelotas.



**Figura 16.2:** Juego de pelota en Xochicalco. Fotografía de Carlos H. Torres, distribuida bajo la licencia [CC BY-SA 3.0](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/).

en diferentes puntos se obtienen movimientos distintos. Los más sencillos

se originan cuando golpeamos la bola con el taco colocado en posición horizontal y apuntando al centro de la bola. Este golpe en la peculiar jerga del billar se conoce como «pegarle sin efecto». Nos referimos ahora a la figura 16.3 en la que se muestran pelotas lisas usadas en el billar, el ping pong y el boliche. Pensemos primero en el billar. Se han marcado los puntos A, B y C en la bola de billar como se ve en la figura de la izquierda. Si golpeamos con el taco arriba del punto A, la velocidad que el punto C adquiere por efecto de la rotación es mayor y con dirección contraria a la velocidad que se le imprime al centro de la bola; por tanto, el punto C se mueve hacia atrás y aquí entra en juego la fricción entre la bola y la mesa. Ya que la fricción actúa en la dirección contraria a la velocidad de C, o sea hacia adelante, la fuerza de fricción ayuda al golpe original produciendo una aceleración del centro de masa de la bola. He aquí un caso en que la fricción no se opone al movimiento. Sin embargo, como sí se opone al movimiento del punto C relativo a la mesa, llegará un momento en que C esté en reposo y la bola rodará sin patinar. El efecto contrario se da cuando el golpe es por debajo del punto A. En este caso, el centro de masa de la bola perderá impulso y su velocidad disminuirá hasta que la condición de que no patine se haya establecido.



Figura 16.3: Pelotas lisas.

Apliquemos con el taco un impulso  $\mathbf{J}$  a la bola que adquiere un momento lineal  $M\dot{\mathbf{R}} = \mathbf{J}$  y un momento angular  $I_0\omega = Jz_0$ , donde  $z_0$  es la altura del golpe respecto al centro de masa  $G$ , como se muestra en la figura 16.4; aquí el momento de inercia toma el valor  $I_0 = 2Mh^2/5$ , si llamamos  $h$  al radio de la bola. Para que la bola ruede sin resbalar se debe cumplir la condición  $\omega h = \dot{R} = J/M = I_0\omega/Mz_0$ . De aquí se deduce de inmediato que

$z_0 = 2h/5$ . Por tanto, si  $\mathbf{J}$  actúa con un brazo de palanca  $z > z_0$ , el punto  $O$  se movera respecto al piso con una velocidad hacia la izquierda de la figura 16.4, aparece una fuerza de fricción cinética que se opone a este movimiento de  $O$  y que se añade a  $\mathbf{J}$  para acelerar la bola hacia la derecha. Lo contrario ocurre cuando el taco golpea a una distancia  $z < z_0$ .

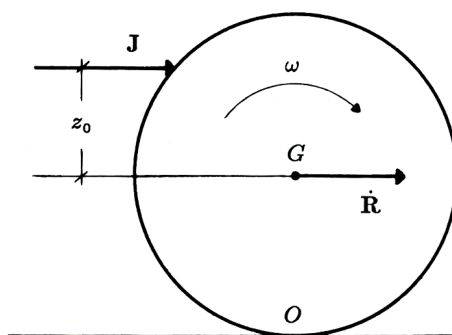


Figura 16.4: El impulso  $\mathbf{J}$  actúa sobre una esfera.

Vamos ahora a explicar la corrida y la jalada en el billar. En el primer tiro, una bola choca contra otra igual; después del choque pierde el momento del centro de masa pero conserva su momento angular. Si hemos golpeado por encima del ecuador, el punto  $C$  se movería hacia atrás y la fricción empujaría a la bola que seguiría al blanco. Ésta es la llamada «corrida» en el billar, la cual se explica en la figura 16.5. Lo contrario ocurre si se golpea con el taco debajo del punto  $B$ , es decir, abajo del ecuador. En tal caso, después del choque la fricción empuja al proyectil hacia atrás y se produce la llamada «jalada» en el billar, que se muestra en la figura 16.6.

También es posible que las bolas que giran al chocar con las bandas de la mesa del billar violen la ley de la reflexión. Dándole el efecto de contra incluso pueden después de chocar recorrer la trayectoria inicial pero en sentido opuesto. En la figura 16.7 se muestran tres casos: cuando la bola no tiene efecto en 16.7a, y cuando tiene rotación en un sentido y en el opuesto en las figuras 16.7b y 16.7c. Algo semejante ocurre con las pelotas de ping-pong al chocar con la mesa y con las bolas del boliche cuando girando recorren la pista.

El movimiento de una pelota en el aire cambia según el giro que la pelota lleve. En la figura 16.8 se muestran cuatro casos con una pelota de ping-pong. La curva 1 es la trayectoria parabólica que seguiría un punto masa en el campo gravitacional constante. La curva 2 es el movimiento real observado cuando la pelota no gira, pero es frenada por la fricción con el aire.



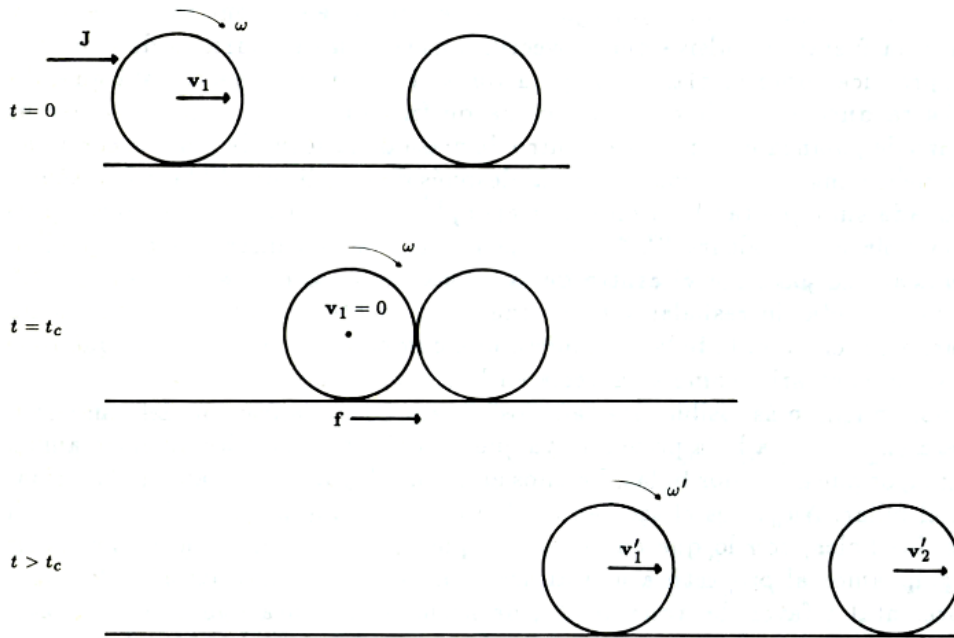


Figura 16.5: La «corrida» en el billar.

Se ve que el alcance ha disminuido. Hagamos ahora que la bola gire de dos formas distintas: cuando se le da espín en el sentido contrario al del movimiento del centro de masa, la bola sigue la trayectoria 3, mientras que cuando el espín es en el sentido del movimiento de traslación, la trayectoria recorrida es la que se marca 4. Nótese que el alcance depende de la dirección del giro.

Hemos considerado a las pelotas como un cuerpo completamente rígido. En lo que sigue, cuando analicemos varios deportes, seguiremos suponiendo esta aproximación quedista mucho de ser cierta en todos los casos.

La física del fútbol depende en buena medida del balón, de su radio, de las costuras en su superficie y de su masa. Por ejemplo, el tiempo de rebote de una pelota que se deja caer verticalmente sobre la cancha, dura menos si la masa decrece. De hecho, este tiempo de contacto con el suelo es proporcional a la raíz cuadrada de la masa, y si ésta es igual a 0.45 kilogramos, el tiempo es de 8 milisegundos. Este tiempo depende también del radio de la pelota y de su presión interna. Todos hemos visto que cuando esta última es muy baja, es decir, cuando el balón está desinflado, el tiempo de rebote es muy largo: el balón se queda en el piso.

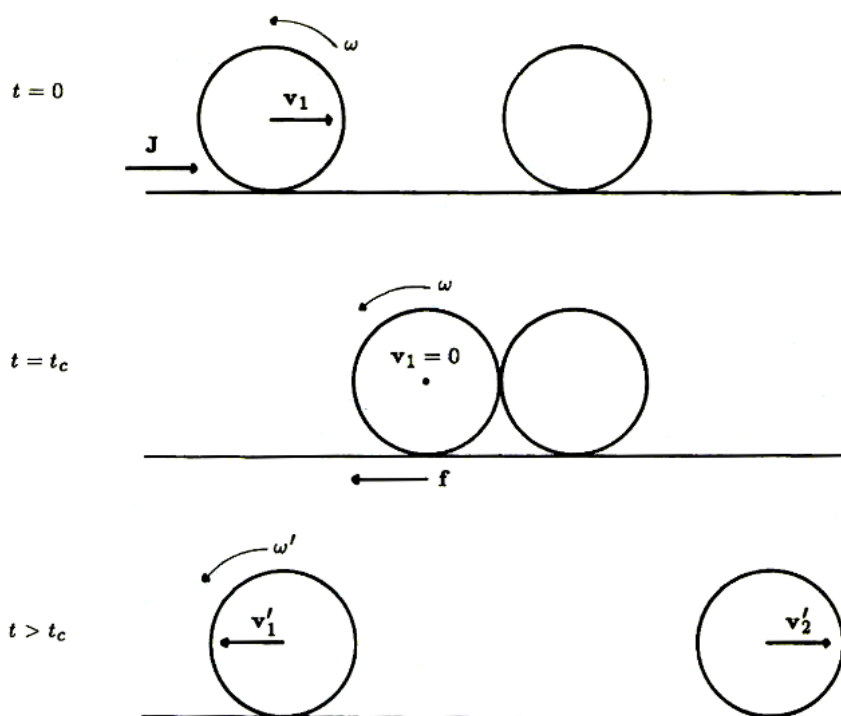
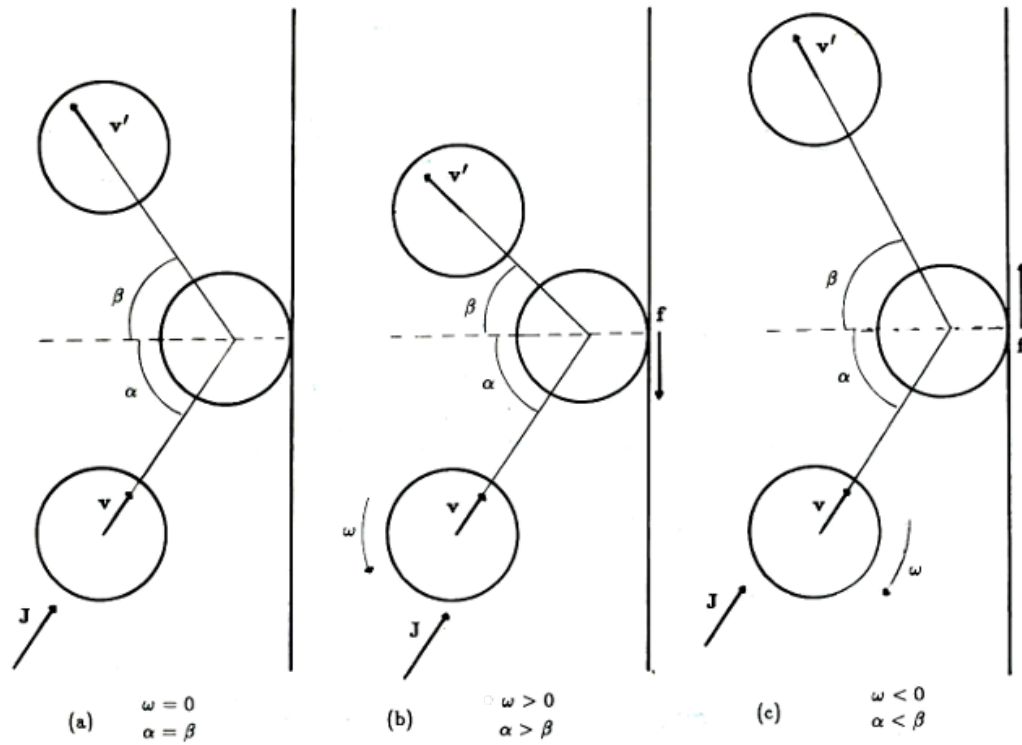
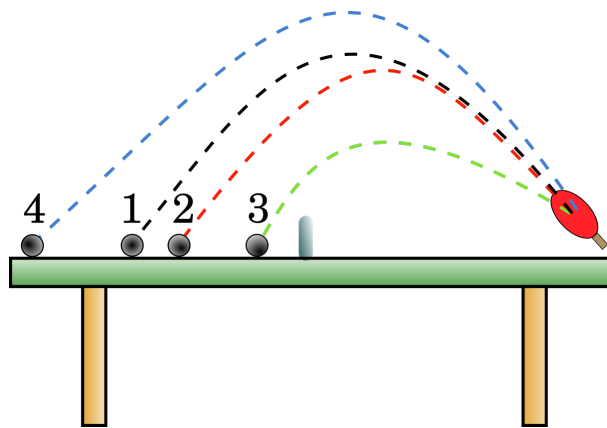


Figura 16.6: La «jalada» en el billar.

Debemos luego averiguar qué pasa cuando se golpea una partícula. La patada dura muy poco, todo sucede como si el tiempo no transcurriera mientras el pie del jugador está en contacto con la bola. Si observamos la pelota, vemos que no conserva su velocidad inicial. El balón sube y luego baja. Debemos formular alguna hipótesis para entender cómo cambia su velocidad, es decir, su aceleración. ¿Qué o quiénes pueden afectar a la partícula? Desde luego, los otros jugadores, el aire y la cancha misma. En nuestro ejemplo, los otros jugadores no tocaron la pelota; además, el aire es muy ligero, mucho más que la pelota. En consecuencia, tiene que ser la cancha, que es un pedazo de nuestro planeta, la que produzca la aceleración. Es la Tierra la que ejerce una atracción, que llamamos gravedad, que frena la pelota al subir y la hace luego caer. Fue el físico inglés Isaac Newton (1642–1727) quien se dio cuenta que en la patada el pie del futbolista ejerce una fuerza instantánea y luego la Tierra jala al balón con la fuerza de la gravedad. Esta descripción nos hace entender por qué la pelota sube y baja en una trayectoria parabólica. Sin embargo, lo anterior no nos explica



**Figura 16.7:** Reflexión de una bola de billar en una banda, en (a) sin efecto, y con efecto en uno y otro sentidos (b) y (c).



**Figura 16.8:** Trayectorias en el aire de pelotas que giran.



**Figura 16.9:** Pelotas rugosas.

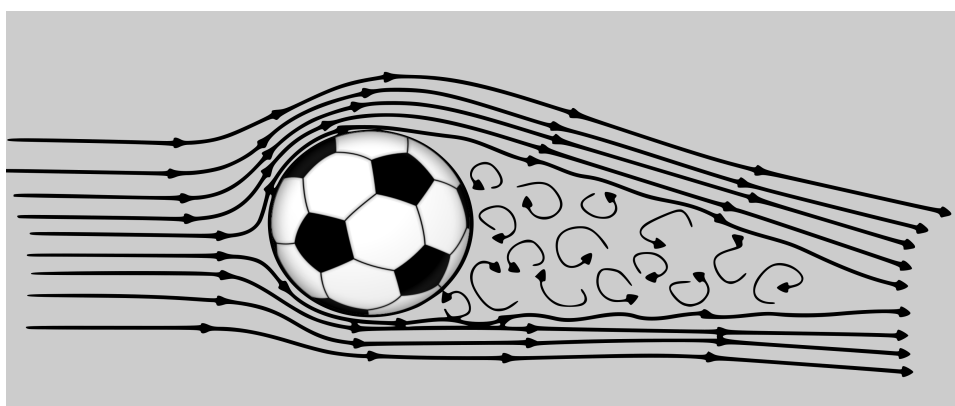
cómo se consiguen esos cambios abruptos que engañan al portero, porque no hemos tomado en cuenta el chanfle.

Sólo es posible explicar el movimiento con chanfle si tomamos en cuenta que el balón no es un punto, sino una esfera que puede girar en el aire. La explicación que suele darse es que cuando la pelota de fútbol gira, arrastra el aire que la rodea y altera su velocidad. Cuando el aire se mueve su presión cambia. Esto se llama el principio de Bernoulli en honor de un físico y matemático suizo (1700–1782). Este principio nos dice que a mayor velocidad del aire, la presión que ejerce es menor. Según la dirección de giro del balón, el aire se mueve más rápido o más despacio a cada lado de la pelota. De ahí surge una fuerza lateral que empuja al balón y lo saca de su trayectoria parabólica: así se engaña al portero.

Para entender el movimiento de un cuerpo en un fluido como el aire, se ha desarrollado una rama de la física que se llama aerodinámica. Los estudios aerodinámicos se realizan en muchos laboratorios no para comprender mejor el fútbol, sino porque este problema es crucial en la aviación para diseñar mejor las alas y fuselajes de las aeronaves.

La explicación basada en el principio de Bernoulli no es completamente correcta. Hay desde luego una diferencia en la velocidad del aire a cada

lado de la pelota que gira, pero el patrón del flujo del aire alrededor de la pelota es muy complicado y hace el cálculo de las diferencias de presiones muy complejo. El primer físico que atacó este problema fue Gustav Magnus, en la Alemania del Siglo XVII. Él se dio cuenta que el balón que rota está sujeto a una fuerza lateral. En su honor, este fenómeno se conoce hoy en la física como el efecto Magnus. Veamos una forma sencilla e intuitiva para entender este efecto.



**Figura 16.10:** Efecto Magnus. Ilustración de Sanu N, distribuido bajo la licencia [CC BY-SA 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/).

La pelota al girar acelera el aire de un lado y lo frena del otro. Del lado en que el aire se mueve más rápido, éste se adhiere más a la bola. En cambio, del lado en el que el aire se mueve más despacio, se desprende antes. El resultado neto es que la bola que gira avienta al aire de lado. La reacción a esta fuerza es justamente la llamada fuerza de Magnus. Podríamos decir que el aire rebota en la pelota y la mueve de lado. Sin que entremos aquí en los detalles del cálculo, la desviación de la trayectoria debida a la fuerza de Magnus es proporcional al número de vueltas que da la pelota. Por ejemplo, una pelota que se desvía un metro después de recorrer una distancia total de 20 metros, debería haber dado casi cinco vueltas en su viaje. A un buen aficionado, adicto a ver partidos de fútbol en la televisión, este resultado podría parecerle exagerado, pues al ver la bola en cámara lenta parece rotar muy poco.

PARA SABER MÁS:

- Goldstein H., Poole C., Safko J., *Classical mechanics*, Addison Wesley, (EUA, 2002).
- José J., Saletan E., *Classical Dynamics*, Cambridge University Press, (EUA, 1998).
- Hestenes D., *New Foundations for Classical Mechanics*, Kluwer Academic Publishers, (Holanda, 1986).
- Flores J., Anaya G., *Dinámica del cuerpo rígido*, Fondo de Cultura Económica, (México, 1989).
- Del Río F., Flores J. *Conceptos de la física clásica*, Fondo de Cultura Económica, (México, 1989).

## EL SISTEMA PLANETARIO

*Jorge Flores Valdés\***Sergio Sánchez*

Uno de los éxitos más grandes y profundos de la física clásica lo expuso Sir Isaac Newton en el tercer libro de los Principia Matemática: El Sistema del Mundo. Ahí aplica sus leyes de movimiento para entender cómo se mueven los planetas alrededor del Sol siguiendo las leyes de Kepler. Presentaremos a continuación una explicación de lo que Kepler encontró, usando primero un modelo de partículas independientes, en el cual sólo el Sol interactúa con cada planeta y no se toman en cuenta las acciones de los demás planetas. Después enunciaremos la teoría de perturbaciones en mecánica clásica, para tomar en cuenta el efecto de los planetas restantes.

Para formular una teoría física de un sistema dado, es necesario definir con precisión el sistema, las leyes de movimiento que lo rigen, y las interacciones de las partes que lo componen. En el caso del sistema planetario, estos elementos son:  $N$  masas  $m_i$  de los planetas que interactúan entre ellos y con otra masa  $M \gg m_i$ , la masa del Sol. La fuerza entre esos cuerpos obedece la ley de la gravitación universal, y las ecuaciones de movimiento son las tres leyes que Newton formuló para establecer la mecánica clásica. Ya que la masa  $M$  del Sol es enorme comparada con la de los planetas, es de suponerse que la estrella se movería poco, estaría casi fija en lo que llamaremos el origen de coordenadas. Además, la acción del Sol sobre cada planeta es mucho mayor que la de un planeta sobre los otros. Así para entender el movimiento de la Tierra, de las  $N + 1$  partículas originales nos resta sólo una de masa  $m_T$ , la de la Tierra, que se mueve sujeta a la fuerza  $GMm_T/r^2$ , donde  $r$  es la distancia Sol-Tierra.

En la tabla 17.1 presentamos las masas de los planetas y del Sol, así como las características en promedio de las órbitas planetarias. En particular,

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

es de hacerse notar que la excentricidad de las órbitas es muy pequeña, por lo que suponer que la órbita es una circunferencia es muy buena aproximación. Las leyes segunda y tercera de Kepler se siguen de inmediato. En efecto, la fuerza gravitatoria iguala a la centrípeta  $m_T r / \tau^2$ , donde  $\tau$  es el período, constante si  $r$  lo es. Entonces, el cuadrado del período es proporcional a  $r^3$ , como indica la tercera ley de Kepler. Ya que  $\tau$  es constante,  $\omega = 2\pi/\tau$  también lo es y  $(\omega r) r$ , el área barrida en el tiempo por el vector de posición no cambia; ésta es la segunda ley de Kepler. La ley primera requiere un poco más de análisis.

	Masa/ $(m_T)$	Distancia promedio al Sol (UA)	Fuerza sobre la Tierra (N)	Excentricidad de la órbita
Sol	332959.64	0	$3.42 \times 10^{22}$	–
Mercurio	0.055	0.61	$1.57 \times 10^{16}$	0.2056
Venus	0.815	0.28	$1.11 \times 10^{18}$	0.0068
Tierra	1.0	1.0	0.0	0.0167
Marte	0.107	0.52	$4.21 \times 10^{16}$	0.0934
Júpiter	317.80	4.20	$1.92 \times 10^{18}$	0.0483
Saturno	95.15	8.52	$1.39 \times 10^{17}$	0.0560
Urano	14.536	18.21	$4.66 \times 10^{15}$	0.0461
Neptuno	17.0	29.09	$2.14 \times 10^{15}$	0.0097

**Tabla 17.1:** Algunas cantidades relevantes del sistema planetario.

Vamos a introducir ahora dos conceptos que aparecen con frecuencia en la física moderna: los modos colectivos y las cuasipartículas. En el [Capítulo 30](#) se profundiza más sobre estas últimas. El caso más sencillo en que aparecen estos dos conceptos es el problema de dos cuerpos de masas  $m_1$  y  $m_2$  que interactúan con una fuerza que sólo depende del vector relativo  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ . La coordenada  $\mathbf{R}$  del centro de masa es el modo colectivo. Por otro lado, una cuasipartícula de masa  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  obedece la segunda ley de Newton con una aceleración  $\ddot{\mathbf{r}}$ . Hemos pues introducido dos nuevas coordenadas  $\mathbf{R}$  y  $\mathbf{r}$ . La primera corresponde a un movimiento cooperativo en el cual intervienen las coordenadas de todas las partículas del sistema. La segunda es un movimiento semejante al de una partícula, cuya masa es la masa efectiva  $\mu$ . Podemos ahora refinar nuestros argumen-



tos anteriores cambiando la masa  $m_T$  por la de una cuasipartícula cuya masa es  $0.988887 m_T$ , casi igual a la masa terrestre porque el Sol es muy masivo. Como la fuerza Sol-Tierra es una fuerza central, el momento angular se conserva y la órbita es plana, como indica una de las partes de la primera ley de Kepler.

La cuasipartícula tiene ahora dos grados de libertad. Podemos eliminar uno de ellos si utilizamos un sistema de referencia  $S'$  con su eje  $X'$  siempre en coincidencia con el vector relativo  $\mathbf{r}$  de la masa  $\mu$ . El nuevo sistema ya no es inercial como aquel que usamos originalmente para expresar las leyes de Newton con los vectores  $\mathbf{r}_1$  y  $\mathbf{r}_2$ . El sistema  $S'$  no es inercial porque gira con la velocidad  $\dot{\theta} = \omega$ . Aparecen entonces las fuerzas inerciales: la centrífuga  $\mathbf{F}_c$ , la de Coriolis  $\mathbf{F}_{Co}$  y la de Euler  $\mathbf{F}_E$ ; esta última surge cuando  $\dot{\theta}$  varía en el tiempo, como es el caso de la Tierra. Si  $\boldsymbol{\omega}$  es el vector de velocidad angular se tiene:

$$\mathbf{F}_c = -m_T \boldsymbol{\omega} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}'_T),$$

$$\mathbf{F}_{Co} = -2m_T \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}'_T,$$

$$\mathbf{F}_E = -m_T \dot{\boldsymbol{\omega}} \times \mathbf{r}'_T.$$

Tanto  $\dot{\boldsymbol{\omega}}$  como  $\boldsymbol{\omega}$  son vectores perpendiculares al plano, por lo que la fuerza de Coriolis y la de Euler tienden a sacar a la partícula del plano de la órbita; como esto por definición no ocurre, estas dos fuerzas deben cancelarse. Esta afirmación puede demostrarse fácilmente si se toma en cuenta la conservación del momento angular. Nos restan pues sólo la fuerza gravitatoria y la centrífuga. Se ha logrado algo impresionante: redujimos el problema de dos masas, cada una con tres grados de libertad, al del movimiento de una cuasipartícula en la dirección radial sujeta al potencial efectivo  $V_{ef}(r) = (l^2/2\mu r^2) - (GM/r)$ , con una magnitud del momento angular constante  $l$  y cuya gráfica se presenta en la figura 17.1.

Si la energía  $E$  tiene un valor mínimo,  $E_c$ , para el potencial efectivo, lo que se da para  $r_c = l^2/GM\mu$ ,  $r$  es siempre constante por lo que la Tierra sigue una órbita circular. Si la energía vale  $E_3 < E_c$  el potencial efectivo se parece a una parábola y la partícula oscila con una frecuencia  $\Omega_r = G^2 M^2 \mu / l^2$ . La variable angular  $\theta$  obedece la tercera ley de Kepler con  $\Omega_\theta = \sqrt{GM/r_c^3} = G^2 M^2 \mu / l^2$ , por lo que las frecuencias en  $r$  y  $\theta$  son iguales. El problema es entonces equivalente a una partícula que se mueve en un plano y sujeta a dos resortes iguales. La órbita es entonces la figura de Lissajous más sencilla: ¡una elipse! Con ello comprobamos la segunda parte de la primera ley de Kepler: la órbita no sólo es plana, es una elipse. Vemos que cuando la

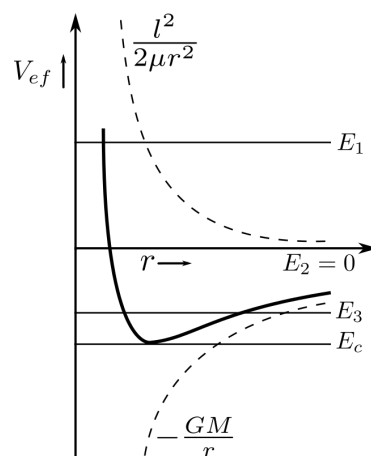


Figura 17.1: Potencial efectivo.

órbita es circular en  $\mathcal{S}'$  se cancelan las fuerzas: la atracción gravitacional se anula con la fuerza centrífuga y la fuerza de Euler con la de Coriolis. Tenemos un sistema en el cual una partícula estaría libre de toda influencia, y el sistema inercial hace su aparición. Paradójicamente, es la no inercialidad de  $\mathcal{S}'$  lo que nos permite en una cierta aproximación ver que en verdad un sistema inercial puede ser concebido.

La información que se puede extraer al considerar solamente la influencia del Sol sobre cada planeta es bastante precisa. Esto se debe a que el Sol es miles de veces más pesado que los planetas. Sin embargo, hay detalles que no se capturan bien con este planteamiento: las precesiones de los planetas y los equinoccios. Para problemas de más de dos objetos no existe solución analítica, para abordarlos se puede utilizar una herramienta muy usada en diferentes áreas de la física como es la teoría de perturbaciones. La esencia de esta teoría es encontrar la solución a un problema que difiere en una cantidad *pequeña* de otro cuya solución es exacta. Hay que subrayar que si bien el problema planteado puede diferir en un cantidad muy pequeña, después de un tiempo el efecto puede ser muy diferente al del problema inicial, ver [Capítulo 25](#), por ese motivo cuando se aplica la teoría de perturbaciones a un problema se debe de proceder con cuidado.

Se puede decir que la teoría de perturbaciones esta dividida en dos variantes: la dependiente del tiempo y la independiente del tiempo. Para el caso de el corrimiento del perihelio de Mercurio el problema debe tener la siguiente forma:

$$H(J, \varphi) = H_0(J) + \epsilon f(J, \varphi).$$

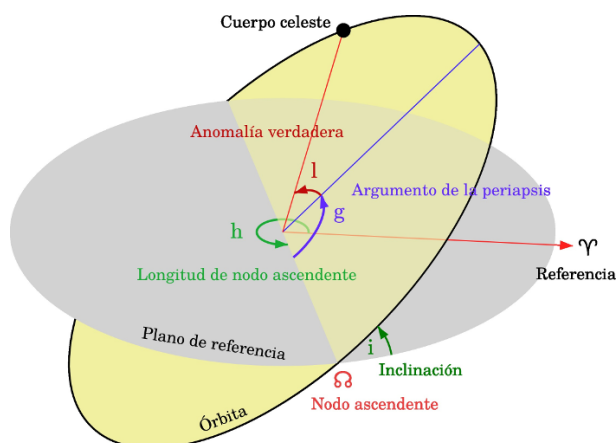
En general los pasos para resolver el sistema anterior son los siguientes:

- a) construir una transformación canónica adecuada cercana a la identidad, donde  $H_0$  es integrable,
- b) expandir en series de Taylor sobre el parametro  $\epsilon$  de perturbación,
- c) pedir que las transformaciones desconocidas remuevan la dependencia de las variables de ángulo-acción hasta términos de segundo orden,
- d) desarrollar en series para obtener una forma explícita de la transformación canónica.

Por lo tanto para analizar la precesión del perihelio de Mercurio se toma en cuenta también la influencia de Júpiter sobre el sistema Mercurio-Sol y aparecerá como el término perturbativo del hamiltoniano. Éste problema se conoce clásicamente como el problema de los tres cuerpos. Sin embargo esto se simplifica aun más si suponemos que tanto Mercurio como el Sol y Júpiter se mueven en el mismo plano y que además Júpiter describe una órbita circular alrededor del Sol. Este tipo de simplificación conduce a lo que se conoce como *el problema restringido de los tres cuerpos*.

Lo usual es trabajar en una transformación canónica de variables de acción-ángulo. Sin embargo, desde el siglo XIX los astrónomos encontraron una transformación más adecuada para trabajar este tipo de problemas de mecánica celeste. Estas variables se conocen como variables de Delaunay, figura 17.2. Con la ayuda de esta transformación se llega a la solución del problema, para ver el desarrollo completo se puede consultar el libro de A. Celletti.

Como hemos visto, la teoría newtoniana predice que los planetas giran alrededor del Sol en una elipse, con el astro en uno de sus focos. Ésta es una curva cerrada, que debería recorrerse una y otra vez. Sin embargo, los astrónomos observaron para el perihelio de Mercurio no es el caso, éste se desplaza lentamente. A lo largo de un siglo se corre un ángulo de 42 segundos; como Mercurio recorre su órbita completa unas 400 veces en cien años, el perihelio se mueve como un décimo de segundo de arco entre una revolución y la siguiente. Este resultado, en conflicto con la teoría gravitacional de Newton, perturbó al mundo astronómico durante mucho tiempo. Incluso el efecto de otros planetas sobre Mercurio era incapaz de predecir correctamente el corrimiento observado. Con la Teoría General de la Relatividad de Einstein, por otro lado, se calculó el movimiento del perihelio de Mercurio y ¡los cálculos concordaban con lo observado! Después de que Einstein publicó sus nuevas leyes, el movimiento del perihelio también se observó para



**Figura 17.2:** Las variables de Delaunay se expresan en términos de la inclinación de la órbita sobre un plano de referencia ( $i$ ), la anomalía verdadera ( $l$ ), el argumento de la periapsis ( $g$ ) y la longitud del nodo ascendente ( $h$ ). Además de la excentricidad de las órbitas ( $e$ ) y el semieje mayor orbital ( $a$ ).

la Tierra e incluso para Marte. Así el cálculo obtenido por medio de la teoría de perturbaciones quedó como una buena aproximación hasta cierto límite. Mientras que la teoría de Einstein predecía la influencia de la gravedad sobre la luz durante el eclipse de 1919. Recientemente la comprobación experimental de las ondas gravitacionales también fue predicha por la teoría general de la relatividad, cómo se explica en el [Capítulo 13](#).

PARA SABER MÁS:

- Simmonds J., Mann J., ***A first look at perturbation theory***, Dover Publications, (USA, 1997).
- Goldstein H., Poole C., Safko J., ***Classical mechanics***, Addison Wesley, (EUA, 2002).
- Del Río F., Flores J., ***Conceptos de la física clásica***, Fondo de Cultura Económica, (México, en prensa).
- Percival I., Richards D., ***Introduction to dynamics***, Cambridge University Press (UK, 1982).
- Celletti A., ***Stability and chaos in celestial mechanics***, Praxis Publishing Ltd., (UK, 2010).

## IV

# TERMODINÁMICA, TRANSICIONES DE FASE Y FÍSICA ESTADÍSTICA



## LAS LEYES DE LA TERMODINÁMICA... ¿SON CUATRO?

Rosalío Rodríguez Zepeda\*

Convencionadamente, la termodinámica se basa en tres leyes (primera, segunda y tercera), pero podría agumentarse que puede haber muchas otras. Este punto de vista se hace más comprensible notando que la primera y segunda leyes postulan que dos cantidades medibles la energía interna  $U$  y la entropía  $S$ , respectivamente, son funciones de estado y dependen de las variables termodinámicas de estado escogidas como independientes. Pero  $U$  y  $S$  también podrían ser consideradas como variables de estado puesto que las relaciones termodinámicas funcionales podrían usarse para eliminar algunas de las variables de estado originales. Este es el caso de la temperatura, o de la tercera ley. De modo que, ¿cuántas son entonces las leyes básicas de la termodinámica, dos, tres o cuatro? Veamos.

Etimológicamente la palabra termodinámica significa la dinámica del calor. Efectivamente, el calor puede ser dinámico, puede fluir y moverse de un objeto a otro. Históricamente, las leyes que gobiernan el comportamiento del calor se descubrieron estudiando las máquinas de vapor, pues desde tiempos inmemoriales ya se había observado que el vapor puede ser una fuente de potencia. En efecto, hace dos mil años —alrededor del 15 a. C.— el ingeniero romano Vitruvio inventó una máquina llamada *eolípila* y un siglo más tarde el griego Herón de Alejandría construyó una (ver figura 18.1). Está considerada como la primera máquina térmica de la historia y está constituida por una cámara esférica o cilíndrica de aire, con tubos curvos por donde es expulsado el vapor. De acuerdo con la ley de acción-reacción, la fuerza resultante por esta expulsión hace que el mecanismo comience a girar.

Sin embargo, esta máquina no era una máquina de vapor, las cuales obtienen trabajo mecánico mediante el aporte de calor de una fuente o foco

---

\*Departamento de Sistemas Complejos, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

caliente, para ceder parte de este calor a la fuente o foco frío. La diferencia entre los dos calores tiene su equivalente en el trabajo mecánico obtenido.



**Figura 18.1:** La eolípila construída por Herón de Alejandría.

En realidad la primera máquina de vapor capaz de obtener beneficios comerciales fue construída por Thomas Newcomen en 1712 y disparó la Revolución Industrial, aunque era una máquina muy poco eficiente, entendida la eficiencia como el cociente de la energía de salida de la máquina, a la energía de entrada. El buscar la respuesta a la pregunta ¿qué tan eficiente puede ser una máquina térmica? hizo más que describir los límites de las máquinas de vapor y creó una rama nueva de la física, cuyas aplicaciones casi no tenían límites. La termodinámica describe propiedades macroscópicas de la materia, y aunque sabemos que la materia está compuesta por partículas elementales y tiene una estructura detallada y organizada, esta información no puede usarse en el razonamiento para construir la termodinámica. Sin embargo, esto no significa que no sea posible —o deseable— usar información extra-termodinámica junto con los métodos termodinámicos.

Esta nueva física arrojó luz desde el comportamiento de los gases hasta la estructura misma de todo el universo; se aplicó no solo a la materia inanimada de la física y la química, sino también a los procesos complejos de la propia vida. Al igual que las leyes de conservación de la energía en mecánica descartaron las máquinas mecánicas de movimiento perpetuo, las leyes de la termodinámica descartaron máquinas similares que usan calor. Todo tipo de energía destinada a producir un trabajo útil se disipa finalmente en



forma de calor. La disipación es la transformación inevitable de la energía a una forma con menor capacidad de trabajo y siempre acompaña a todo proceso termodinámico real. Tarde o temprano, todo sistema aislado llega al estado de equilibrio, el cual corresponde, como se discutirá más adelante, al valor máximo de la entropía.

La primera ley de la termodinámica revela una nueva forma de energía asociada al calor, y extiende la ley de conservación de la energía al nuevo mundo de las máquinas térmicas. La segunda de estas leyes muestra que algunas maneras potenciales de intercambio de calor, las cuales no entran en conflicto con la conservación de la energía, son no obstante imposibles. La termodinámica se basa en leyes fenomenológicas directamente inferidas de las observaciones, describe los estados de equilibrio termodinámico a nivel macroscópico y cómo los sistemas reaccionan a los cambios en su entorno. También considera la interacción entre el calor y otras manifestaciones de la energía, por lo que se puede aplicar a una amplia variedad de ramas de la ciencia y de la ingeniería. Como ciencia fenomenológica, la termodinámica no se ocupa de ofrecer una interpretación física microscópica de sus magnitudes; es la mecánica estadística, íntimamente relacionada con la termodinámica, la que ofrece una interpretación microscópica de las cantidades termodinámicas. Así por ejemplo, la energía interna se identifica con la suma de las energías individuales de los átomos y moléculas del sistema, y la entropía mide el grado de orden y el estado dinámico microscópico de sistemas constituidos por muchas partículas microscópicas. La entropía también tiene una conexión muy fuerte con la teoría de la información.

La llamada ley cero de la termodinámica es una ley fenomenológica para sistemas que se encuentren en equilibrio térmico. Surgió tardíamente cuando ya la primera y la segunda leyes habían sido establecidas. La ley cero describe la transitividad del equilibrio térmico: si el sistema  $A$  está en equilibrio con el sistema  $B$ , y éste con otro sistema  $C$ , entonces  $A$  y  $C$  también están en equilibrio. Esta ley empírica establece que existe una propiedad, denominada temperatura empírica, que es común para todos los estados de equilibrio de sistemas que encuentren en equilibrio mutuo con un sistema dado. La temperatura es una cantidad mucho más cercana a nuestra intuición que la entropía o la energía interna y la ley Cero es de gran importancia experimental, pues permite construir instrumentos que midan la temperatura de un sistema (termómetros). Fue formulada por primera vez en 1931 por Ralph. L. Fowler, de modo que, a primera vista, las tres leyes convencionales de la termodinámica, ¿podrían ser en realidad cuatro?

Por otra parte, de acuerdo con la primera ley de la termodinámica, la

energía se conserva en todo proceso y, por esta razón, también es conocida como el principio de conservación de energía para la termodinámica. Establece que si se realiza trabajo ( $W$ ) sobre un sistema o si éste intercambia calor ( $Q$ ) con otro, la energía interna ( $U$ ) del sistema cambiará. El aumento de la energía interna  $\Delta U$  de un sistema es igual a la suma del calor suministrado al sistema y el trabajo realizado sobre el sistema. Tomando en cuenta los criterios y convenciones de signo usuales para estas cantidades, la primera ley se expresa como  $\Delta U = \Delta Q - \Delta W$ , en donde  $\Delta Q$  es la cantidad de calor suministrada al sistema y  $\Delta W$  es el trabajo realizado por el mismo. De esta manera esta ley permite definir al calor como la energía necesaria que debe intercambiar un sistema para compensar las diferencias entre trabajo y energía interna. Esta ley fue propuesta por Nicolás Leonardo Sadi Carnot en 1824 en su obra *Reflexiones sobre la potencia motriz del fuego y sobre las máquinas adecuadas para desarrollar esta potencia* y, en palabras simples, la primera ley de la termodinámica establece que la energía total del Universo se mantiene constante. No se crea ni se destruye, sólo se transforma. De hecho, en la obra mencionada, Carnot formuló también la segunda ley de la termodinámica; sin embargo, su exposición no fue entendida ni valorada apropiadamente y posteriormente la reformularon Clausius y Kelvin para construir la termodinámica sobre bases matemáticas más firmes.

La segunda ley de la termodinámica establece la dirección de evolución temporal en que deben realizarse los procesos termodinámicos reales y, en consecuencia, establece la imposibilidad de que puedan ocurrir en sentido contrario. Así por ejemplo, una gota de tinta que se difunde en agua no puede volver a concentrarse espontáneamente en la gota inicial. Es decir, esta ley establece que la evolución de los procesos reales es única ya que son irreversibles. En una descripción macroscópica, este comportamiento se caracteriza por el aumento de una cantidad física llamada la entropía ( $S$ ) del sistema termodinámico que obedece el llamado principio de aumento de entropía. Más precisamente, la entropía  $S$  es una función de estado aditiva del sistema, y es igual a la suma de las entropías de los subsistemas. Si al sistema se le suministra calor a una temperatura  $T$ , entonces su entropía  $S$  aumenta en  $\Delta S = \Delta Q/T$ . Así que la segunda ley establece que la entropía de un sistema aislado, i. e., aquel que no intercambia materia ni energía con su entorno y para el que  $U$ ,  $V$ ,  $N$ , son constantes, sólo puede permanecer invariable o aumentar, es decir,  $\Delta S \geq 0$ . La entropía, como la energía, se conserva en los procesos reversibles, mientras que en los irreversibles aumenta. Por ejemplo, al transmitir una cantidad de calor  $\Delta Q$  de un cuerpo con temperatura  $T_1$  a otro más frío con temperatura  $T_2$ , ( $T_1 > T_2$ ), la

variación de la entropía es positiva,

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T_2} - \frac{\Delta Q}{T_1}$$

y la energía térmica pasa del cuerpo caliente al más frío. Debido a esta ley también se tiene que el flujo espontáneo de calor siempre es unidireccional, desde los cuerpos de mayor temperatura hacia los de menor temperatura, hasta lograr un equilibrio térmico. Esta ley también establece la imposibilidad de convertir completamente toda la energía de un tipo a otro sin pérdidas y pone límites a la cantidad de trabajo útil que puede extraerse del trabajo. De esta forma, el segundo principio impone restricciones a las transferencias de energía que hipotéticamente pudieran llevarse a cabo teniendo en cuenta sólo el primer principio, y establece que la variación de la entropía de un sistema aislado siempre debe ser mayor que cero y que exhibe un valor máximo en el estado de equilibrio termodinámico definido por las restricciones macroscópicas de no intercambiar ni energía ni masa con sus alrededores. Como  $S$  se maximiza en este estado particular, se comporta de la misma manera que el potencial mecánico lo hace respecto al equilibrio mecánico, excepto que la energía potencial se minimiza. En consecuencia, con frecuencia se dice que la entropía es un *potencial termodinámico* cuyo conocimiento permite calcular todas las propiedades de equilibrio del sistema y la estabilidad de sus estados de equilibrio.

Existen otros enunciados equivalentes para definir este principio, destacándose el de Clausius: *“No es posible ningún proceso cuyo único resultado sea la extracción de calor de una fuente térmica a una cierta temperatura y la absorción de una cantidad igual de calor por otro fuente a temperatura más elevada”*. El enunciado de Kelvin-Planck establece que: *“Es imposible construir una máquina térmica que, operando en un ciclo, no produzca otro efecto que la absorción de energía desde un depósito, con la realización de una cantidad igual de trabajo”*. Sería correcto decir que *“Es imposible construir una máquina que, operando cíclicamente, produzca como único efecto la extracción de calor de un foco térmico y la realización equivalente de trabajo”*. Es decir, es imposible construir una máquina que convierta todo el calor en trabajo. Siempre es necesario intercambiar calor con un segundo foco (el foco frío), de forma que parte del calor absorbido se expulsa como calor de desecho al ambiente. Ese calor desechado que no puede reutilizarse para aumentar el calor (inicial) producido por el sistema (en este caso la máquina), es a lo que —fenomenológicamente— llamamos entropía.

El postulado de Nernst fue formulado entre 1906 y 1912 como resultado

de resultados experimentales de la época. En este sentido es tan empírico por ejemplo, como los enunciados de Clausius o Kelvin. Establece que es imposible alcanzar una temperatura igual al cero absoluto mediante un número finito de procesos físicos. Este principio también puede formularse diciendo que a medida que un sistema se aproxima al cero absoluto, su entropía tiende a una constante definida. Sin embargo, desde el punto de vista microscópico cuántico, esto se debe a que un sistema a temperatura cero existe en su estado fundamental, y entonces su entropía sólo está determinada por la degeneración de su estado fundamental. Es decir, requiere del establecimiento previo de la estadística cuántica para ser valorado adecuadamente. Es de hecho inconsistente con la mecánica estadística clásica. Por esta razón hay cierta reticencia a considerar la tercera ley en el mismo sentido convencional de las primera y segunda, porque requiere de conocer cierta información atómica y molecular del sistema, lo cual es contrario al poderoso y elegante método termodinámico que prescinde de cualquier modelo microscópico de la materia. Sin embargo, la mayor parte de la termodinámica clásica no requiere de la utilización de este postulado, por lo que —desde este punto de vista— resulta inapropiado tratarlo como una ley en el mismo sentido que las leyes cero, primera y segunda.

Con el desarrollo de la mecánica estadística, la tercera ley de la termodinámica pasó de ser una ley fundamental (justificada por experimentos) a una ley derivada (derivada de leyes aún más básicas). La ley básica de la que se deriva principalmente, es la definición mecánico-estadística, i. e., microscópica, de la entropía (postulado de Boltzmann) de un sistema con un número  $N$  de partículas del orden del número de Avogadro ( $N \sim 10^{23}$ ):

$$S = k_B \ln \Omega.$$

Aquí  $S$  es la entropía,  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $\Omega$  es el número de microestados consistentes con las restricciones impuestas al estado macroscópico. En mecánica estadística un microestado de un sistema de  $N$  partículas, implica conocer el estado microscópico de todas sus partículas. La mecánica estadística muestra que el número de microestados de un sistema macroscópico es un número muy grande —¡astronómico!—. Como ilustración,  $1 \text{ cm}^3$  de helio a  $300 \text{ K}$  contiene  $N \sim 10^{19}$  partículas y un número de microestados ¡ $\Omega \sim 10^{10^{20}}$ ! Pero como ninguno de ellos tiene preferencia sobre los demás (i. e., todos son igualmente probables), no conocemos en cuál de ellos se encuentra el sistema. Este carácter probabilístico de la descripción mecánico-estadística nos permite dar una interpretación microscópica de la entropía. En efecto, nótese que si el número de microestados  $\Omega$  se es-

tablece respecto a la situación perfecta en que el sistema estuviera en un microestado único ( $\Omega = 1$ ), correspondería a la entropía  $S = 0$ , dado que  $\ln 1 = 0$ . Entonces la tercera ley implica que para sistemas con un único estado fundamental, la entropía es cero,  $S = 0$ . De modo que cuando existe sólo un microestado, el sistema existe en un estado de orden perfecto porque todas sus partículas tienen estados mecánicos microscópicos perfectamente bien definidos. A medida que aumenta el número de nuevas configuraciones posibles, el sistema puede tener más microestados accesibles y se hace más "caótico", porque hay muchos microestados sucesivos posibles en vez del estado inmutable para el que  $S = 0$ . En este sentido específico y preciso, de no conocer cuál es el microestado del sistema, es que la entropía es una medida del desorden en el sistema. Dado el enorme número de microestados accesibles y ante la imposibilidad de poder determinarlos experimentalmente. Desde este punto de vista microscópico, una parte de la segunda ley puede interpretarse diciendo que el sistema exhibe una transición de un estado menos probable de orden a uno más probable de desorden para valores constantes de  $U, V$  y  $N$ .

De modo que, ¿cuántas son las leyes básicas de la termodinámica, dos, tres o cuatro? En conclusión, a la luz de estas ideas puede considerarse que las ¡leyes básicas de la termodinámica son, efectivamente, tres: las leyes cero, primera y segunda!

PARA SABER MÁS:

- Reiss H., *Methods of Thermodynamics*, Dover, N. Y., Estados Unidos, 1965.
- Huang, K., *Introduction to Statistical Physics*, Taylor and Francis, N. Y., Estados Unidos, 2010.
- Lindley D., *Boltzmann's Atom*, The Free Press, N. Y., Estados Unidos, 2001.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

## EL BAILE DE LAS MOLÉCULAS

*Adrián Huerta\**

En capítulos anteriores se ha estudiado lo que ocurre con una sola partícula. Pero en un gas muchas moléculas bailan alrededor de otras e interactúan con ellas. De hecho, en un mol de gas, el número de moléculas es igual al de Avogadro y el número de grados de libertad involucrados es enorme. Esto nos conduce a emplear métodos estadísticos. Se inicia el tratamiento con las observaciones de Robert Brown, las explicaciones de Albert Einstein y Marian von Smoluchowski sobre el origen del movimiento browniano, así como los experimentos de Jean Perrin, confirmando la hipótesis atómico-molecular de la materia. Se hace una analogía con un sistema mecánico y se toma el límite para un gas ideal con ayuda de la teoría cinética y la mecánica estadística, comparando sus resultados con la termodinámica clásica. Al final se discute sobre el determinismo, siendo éste un problema de interés un tanto filosófico e interpretativo de las teorías físicas.

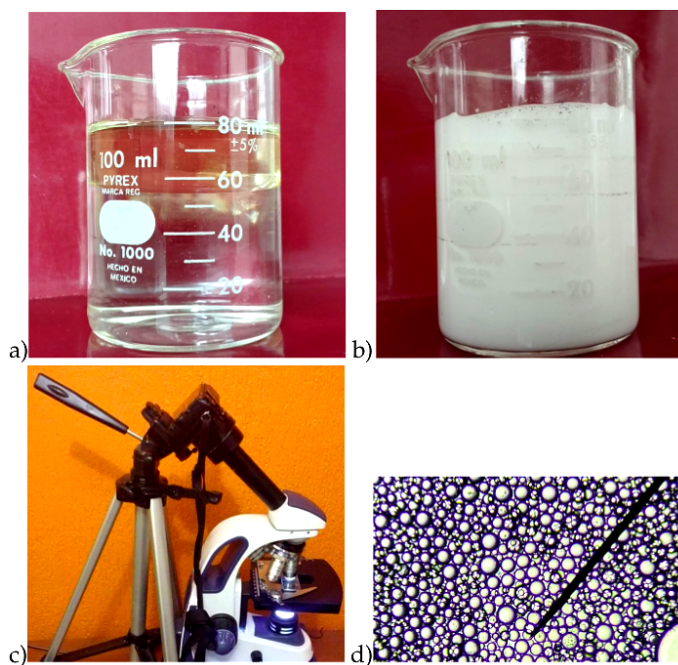
## MOVIMIENTO BROWNIANO

En la actualidad, hablar de átomos y moléculas es bastante común ya que desde los cursos más elementales nos hablan de ellos, y es difícil creer que hubo una época en la que esto no era así, es decir, no se sabía sobre su existencia o se usaban los términos átomos o moléculas de una manera imprecisa para nombrar a las partículas de las que estaban compuestos por ejemplo las plantas, los animales o los objetos inanimados. En este contexto, el botánico Robert Brown observó en 1827 que partículas muy finas obtenidas tanto de materiales orgánicos como inorgánicos, al encontrarse en suspensión, mostraban el mismo extraño movimiento azaroso, que ya era conocido para ese entonces pero del que se desconocía su origen. El hecho

---

\*Facultad de Física, Universidad Veracruzana.

de que se pudiera observar en cualquier tipo de partícula llevó a Brown a concluir que el movimiento no es de naturaleza biológica, como se pensaba, sino más bien de naturaleza física. Por sus observaciones a este fenómeno se le ha llamado movimiento browniano en su honor. Surgieron muchas hipótesis para explicarlo, incluyendo pequeñas corrientes, movimientos causados por el observador, evaporación, etc. Como veremos más adelante, en esa época era difícil obtener una explicación correcta del fenómeno, debido a que los fluidos, como el agua o el aire, donde se mueven estas partículas en suspensión, en nuestra escala se ven como medios continuos. Por ello decayó con el tiempo el interés por buscar una explicación satisfactoria de dicho movimiento [1].



**Figura 19.1:** Experimento casero: se toman 60 ml de agua y 20 ml de aceite; a) al intentarlos mezclar agitando fuertemente se separa el agua del aceite; b) después de agregar una gota de jabón lavatrastes y agitarse fuertemente podemos ver que se mezclan los componentes creándose una sustancia con apariencia lechosa llamada emulsión; c) microscopio óptico convencional; d) emulsión observada al microscopio, donde podemos observar pequeñas gotitas de aceite suspendidas en el agua, las cuales son separadas por el tensoactivo (jabón lavatrastes). Las partículas más pequeñas muestran un movimiento azaroso llamado movimiento browniano, como se menciona en el texto.

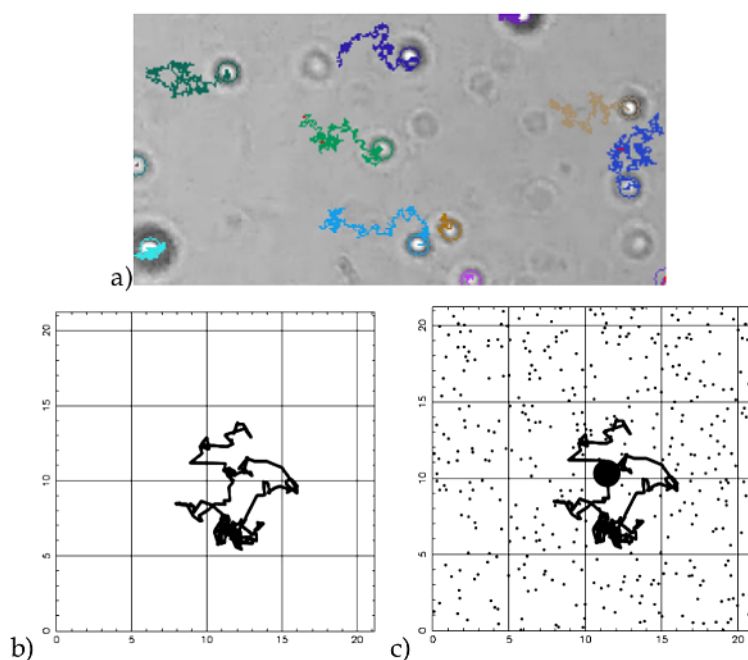


En la figura 19.1 se muestra un experimento ilustrativo que podemos realizar fácilmente. Al intentar mezclar agua con aceite, éstos eventualmente se separan. Sin embargo, al agregar una gotita de jabón lavatrastes (tensoactivo) y agitar nuevamente, se produce una mezcla llamada emulsión. Al mirar la emulsión al microscopio, podemos ver que se han formado pequeñas gotitas de aceite suspendidas en el agua. Las gotitas de aceite que se obtienen quedan rodeadas del tensoactivo (con su parte hidrofóbica hacia el aceite y la parte hidrofílica hacia el agua), estabilizando así la emulsión e impidiendo que se separe el agua del aceite. En las gotitas de aceite menores que unas 8 micras se logra apreciar el movimiento browniano. En la figura 19.2 se muestran algunas trayectorias tomadas con el microscopio de la emulsión preparada anteriormente, al diluirla en 10 partes de agua. Podemos ver que las partículas se mueven de manera aleatoria<sup>1</sup>. Como en los experimentos de Robert Brown y Jean Perrin, en nuestra emulsión el agua se ve como un medio continuo, aun en esta escala, siendo imposible ver a las moléculas que la forman.

Albert Einstein, en su tesis de doctorado en 1905, y posteriormente Marian von Smoluchowski en 1906, estudiaron el movimiento browniano y mostraron que la materia está formada por esas pequeñas partículas bailarinas. Es decir, el agua está formada por moléculas que se encuentran en constante movimiento térmico y es ese movimiento el que produce un golpeo a las partículas en suspensión, dando lugar a su movimiento azaroso. Einstein lo explicó basándose en la mecánica estadística, más abstracta y probabilista, mientras que la explicación de Smoluchowski presentó argumentos de la teoría cinética de los gases. Con ambos estudios se obtuvieron descripciones igualmente importantes, que resultaron estar en perfecto acuerdo con las propiedades físicas del movimiento. Jean Perrin obtuvo el premio Nobel en 1926 por esta verificación experimental. Fueron esas observaciones una de las razones para aceptar que la estructura de la materia es discontinua y con ello ratificar la hipótesis atómico-molecular. Haciendo una analogía, en las figuras 19.2b y 19.2c, mostramos la trayectoria de una partícula, como las que se ilustran en la figura 19.2a, pero obtenidas utilizando una simulación por computadora con el método de dinámica molecular conducida por eventos. En el modelo usado en las simulaciones suponemos que la mezcla está constituida por partículas muy pequeñas, que representan a las moléculas de agua, y una partícula mucho mayor que representa una de las gotitas de aceite atrapadas con el tensoactivo como caso límite de la emulsión muy diluida. Hemos supuesto que las partícu-

<sup>1</sup>Ver video del movimiento browniano en el [material suplementario](#).

las son de coraza dura y que las colisiones entre estas son perfectamente elásticas, es decir, se conservan el momento y la energía, y se obtiene así un movimiento completamente determinista. De esta forma hemos construido un modelo muy mecánico. Usando este modelo podemos observar que, aunque las trayectorias de la simulación son completamente deterministas, el movimiento de la partícula mayor se aprecia completamente azaroso y similar al de los experimentos, debido al caos determinista que presenta el modelo. Verificamos así de una manera muy simple las ideas del origen del movimiento browniano propuestas anteriormente y validadas por Perrin.



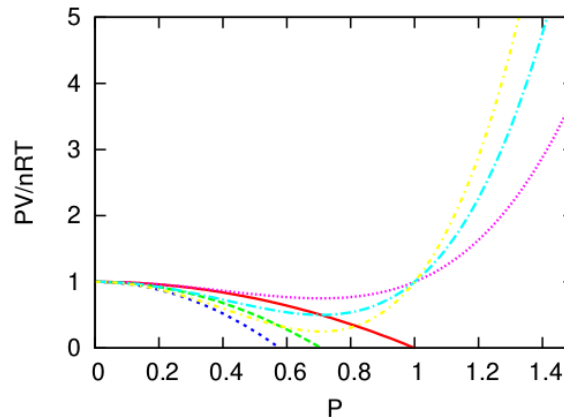
**Figura 19.2:** Ejemplos de movimiento browniano a) trayectorias del experimento obtenidas con el programa de seguimiento “Image J”; b) simulación donde no se muestran los átomos y c) átomos impactando a la partícula coloidal. En el material suplementario se muestra un [video de los experimentos](#) y una [animación](#) correspondiente a las simulaciones hechas con dinámica molecular conducida por eventos.

Cabe señalar que el caos y el azar no son la misma cosa. Más aún, tienen naturalezas completamente diferentes, el primero es determinista, mientras que el segundo es completamente probabilista. Sin embargo, por el gran número de moléculas de agua involucradas, el número de grados de libertad

es tan grande que no es posible observar la diferencia. Debido a lo anterior, surge la pregunta de si la naturaleza obedece un comportamiento determinista como en la termodinámica clásica o la teoría cinética de los gases o si, por el contrario, obedece un comportamiento completamente probabilista como en la mecánica estadística. Para tratar de aclararlo a continuación estudiaremos el límite de un gas ideal usando esas tres metodologías.

### GAS IDEAL

En la figura 19.3 se observa un esquema del comportamiento experimental de diferentes gases. Podemos ver que, en el límite de bajas presiones ( $P$ ), los diferentes gases se encuentran muy diluidos, i. e. volúmenes ( $V$ ) grandes, mostrando un comportamiento universal, es decir, para cualquier cantidad molar de sustancia ( $n$ ) el  $\lim_{P \rightarrow 0} \frac{PV}{nRT} \rightarrow 1$ , independientemente de su temperatura ( $T$ ). Multiplicando por  $R$  la expresión anterior se obtiene  $\lim_{P \rightarrow 0} \frac{PV}{nT} \rightarrow R$ , por esta razón el valor  $R$  se le conoce como la constante universal de los gases.



**Figura 19.3:** Comportamiento experimental de  $PV/nRT$  como función de  $P$  para diferentes sustancias.

Ahora bien, haciendo uso de la termodinámica clásica, experimentalmente se obtiene que a presiones bajas la compresibilidad isotérmica,  $\kappa_T = -\frac{1}{V} (\partial V / \partial P)_T$ , varía como  $\kappa_T \approx \frac{1}{P}$  mientras que el coeficiente de expansión térmico isobárico,  $\beta = \frac{1}{V} (\partial V / \partial T)_P$ , varía como  $\beta \approx \frac{1}{T}$ . Gracias a la ley cero de la termodinámica, sabemos sobre la existencia de la ecuación de estado térmica por lo cual podemos escribir las variaciones de  $P = P(V, T)$

de tal manera que:  $dP = \frac{\partial P}{\partial V}dV + \frac{\partial P}{\partial T}dT$ . Así, usando  $\kappa_T$  y  $\beta$  e integrando obtenemos que  $PV = CT$ . Podemos comparar esta ecuación con el comportamiento experimental observado anteriormente y vemos que si  $C = nR$ , la suposición anterior describe el comportamiento observado a presiones muy bajas<sup>2</sup>. De lo anterior, postulamos la existencia de un gas ideal como aquel que cumple con dichas suposiciones [2].

Retomando el modelo de coraza dura discutido anteriormente, usando teoría cinética en un límite muy diluido y tomando en cuenta que el volumen de las partículas es sumamente pequeño, puede hacerse otra analogía para describir las propiedades dinámicas y termodinámicas de un gas ideal. Consideremos que el gas está compuesto por un número muy grande de dichas partículas y que éstas se encuentran separadas entre sí por distancias muy grandes, sin ejercer fuerzas entre ellas, a excepción de cuando colisionan, con objeto de permitir el intercambio de momento y energía en el límite completamente elástico. Consideremos también que las colisiones con las paredes son perfectamente elásticas y en ausencia de fuerzas externas, las partículas deben distribuirse uniformemente en el espacio. Así, considerando que todas las velocidades son igualmente probables, se puede verificar que la distribución de ellas en equilibrio cumple con la distribución de velocidades de Maxwell-Boltzman. Es decir, mediante argumentos únicamente mecánicos es posible obtener la ecuación de Bernoulli<sup>3</sup>, la cual se obtiene conociendo la distribución de velocidades  $P = \frac{dF}{dA} = \frac{1}{3}m \int_0^\infty v^2 d\rho$ . De aquí se puede escribir  $PV = \frac{2}{3}U$  y comparando con la ecuación obtenida anteriormente  $PV = CT$ , llegamos a reconocer que  $U = U(T) = \frac{3}{2}CT$ , es decir, la ecuación de estado calórica sólo depende de la temperatura como se había observado experimentalmente por Joule y Kelvin. Si se define  $K_B = R/N_A$ , donde  $N_A = 6.022 \times 10^{23}$  es el número de Avogadro y  $K_B$  la constante de Boltzmann, se obtiene que  $PV = NK_B T$  y  $NK_B T = \frac{2}{3}U$ , las dos ecuaciones de estado, térmica y calórica que provienen de la ley cero y de la primera ley de la termodinámica, respectivamente, y que coinciden con el comportamiento universal observado experimentalmente. Nótese que se obtuvieron mediante argumentos microscópicos[1-3]. En otras palabras, podemos recuperar el comportamiento macroscópico mediante la hipótesis de que la materia esta compuesta de las pequeñas partículas bailarinas, invisibles para nuestros ojos.

<sup>2</sup>Incluyendo las leyes de Charles y de Boyle-Mariotte,  $P \propto T$  y  $PV = cte$ , leyes experimentales observadas en sistemas macroscópicos correspondientes.

<sup>3</sup>Daniel Bernoulli en 1738 propuso por primera vez un modelo mecánico para describir las propiedades de un gas, el modelo de esferas duras o bolas de billar [1, 3].

A diferencia de la termodinámica o la teoría cinética, que son completamente deterministas, para finalizar haremos uso del modelo descrito anteriormente en el límite del gas ideal, pero ahora desde el punto de vista completamente probabilístico, es decir, usaremos la mecánica estadística. Al proponer que la energía libre  $F = K_B T \ln(V^N)$ , donde hemos supuesto que la función de partición va como  $V^N$ , integrando sobre todos los grados de libertad, en la aproximación de gas ideal obtenemos que  $P = \frac{\partial F}{\partial V} = \frac{NKT}{V}$ . En resumen, hemos obtenido los mismos resultados para la descripción de un gas ideal, usando la termodinámica, la teoría cinética de los gases y la mecánica estadística. Las dos primeras son descripciones completamente deterministas, mientras que la tercera es completamente probabilista, como se ha mencionado. Por ello, como se mencionó anteriormente, cabe preguntarse si la naturaleza lo es, es decir si los gases reales (en este caso muy diluidos) son deterministas o probabilistas. Todo ello se encuentra en un terreno un tanto filosófico y se abundará más sobre ello en otros capítulos sobre la mecánica cuántica y su interpretación. Sin embargo, cabe resaltar que en nuestro análisis no hay que confundir el modelo con el sistema (real); aquí son las teorías las que son deterministas o probabilistas. Sin embargo, en la medida en la que las teorías pueden hacer predicciones sobre el sistema real, el modelo es adecuado en los límites de su descripción y puede confundirse con el sistema modelado, lo cual es lo que se espera de una buena teoría [4].

PARA SABER MÁS:

- Leopoldo García-Colín Scherer, **Procesos Irreversibles. Teoría y aplicaciones**, Patricia Goldstein Menache. El Colegio Nacional. UAM-Iztapalapa. Tomos 1, 2 y 3. México (2013)

REFERENCIAS

- [1] S. G. Brush, *Kind of motion we call heat: A history of the kinetic theory of gases in the 19th century*. Amsterdam: North-Holland, 1976.
- [2] G. Carmona, *Termodinámica Clásica*, 2a. Edición. Facultad de Ciencias, UNAM: Las prensas de ciencias, 2010.
- [3] L. García-Colín, J. R. Sánchez-López y L. Dagdug, *Introducción a la teoría cinética*. México: El Colegio Nacional, 2011.

- [4] T. A. Brody, *The Philosophy Behind Physics*, L. de la Peña y P. E. Hodgson, eds. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1993.

## LA TERMODINÁMICA DE LOS PROCESOS IRREVERSIBLES: EQUILIBRIO O NO EQUILIBRIO, HE ALLÍ LA CUESTIÓN

*Iván Santamaría Holek\**

**En este capítulo se argumenta cómo la teoría termodinámica actual contempla también la descripción de los procesos irreversibles. A diferencia de los procesos de equilibrio estudiados por la termodinámica clásica, los procesos de no-equilibrio ocurren todo el tiempo en la naturaleza y son la base de los fenómenos de transporte. En este capítulo, se explican sucintamente las ideas esenciales y el desarrollo histórico de la Termodinámica Irreversible desde su inicio en el siglo XIX hasta su formulación más reciente presentada a mitades del siglo XX y se da una perspectiva del desarrollo actual de la teoría.**

En los libros de texto y las discusiones introductorias sobre el tema, es frecuente leer la opinión que afirma que la termodinámica es una disciplina de la física que estudia las propiedades de los sistemas físicos macroscópicos, es decir, aquellos compuestos por un número muy grande de partículas, átomos o moléculas, que manifiestan propiedades térmicas. Semejante afirmación, aunque no es propiamente errónea, resulta fuertemente restringida de enfoque. Es cierto que una gran cantidad de estudios de carácter termodinámico se hacen con el fin de determinar ciertas propiedades de los sistemas, sin embargo en este capítulo presento al lector un enfoque distinto según el cual la termodinámica puede verse como una disciplina capaz de dilucidar y proponer mecanismos que explican el comportamiento dinámico de sistemas tanto equilibrados como no equilibrados con su entorno. Esta versatilidad puede ser aprovechada en la descripción de una cantidad considerable de efectos, propiedades y dinámicas que los sistemas fisicoquímicos manifiestan cuando se encuentran compuestos por colectividades de átomos y moléculas considerablemente numerosas.

---

\*Facultad de Ciencias (Unidad Juriquilla), Universidad Nacional Autónoma de México.

Como una disciplina que se encuentra entre la física y la química, considero que el objetivo propio de la termodinámica no es estudiar solamente las propiedades de los sistemas fisicoquímicos tales como la determinación de las constantes o módulos elásticos, las susceptibilidades dieléctricas y magnéticas o las capacidades caloríficas, entre muchas otras cantidades. La mayoría de los estudios teóricos en este sentido, si no es que todos, están profundamente enraizados en la descripción mecánico-cuántica de los sistemas microscópicos y en su traslación a la física macroscópica por medio de la mecánica estadística, disciplina que desempeña el papel de puente entre las tan dispares escalas de longitud, tiempo y número de entidades que separan a los mundos micro y macroscópicos.

Una ojeada rápida a los libros de texto sobre termodinámica, nos permite vislumbrar que el núcleo de la teoría refiere al problema del intercambio de energía entre sistemas de diversa naturaleza. Como consecuencia de estas leyes generales y de la forma matemático-conceptual elegida para su descripción, existen cantidades definidas nombradas como “propiedad termodinámica”. Así, puede afirmarse que la gran generalidad de la termodinámica se debe precisamente a que los mecanismos y las reglas de razonamiento internos de la teoría no dependen específicamente de la forma matemática de las propiedades que se estén estudiando sino de las hipótesis fundamentales de la teoría.

Estas consideraciones plantean dos caminos de preguntas importantes que se verán, en la medida de lo posible, de forma paralela. Uno es la discusión misma de la naturaleza conceptual de las leyes de la termodinámica y el otro, igualmente interesante, es el camino de las hipótesis fundamentales de la teoría.

#### LAS LEYES TERMODINÁMICAS

Como se puede leer en el [Capítulo 18](#) (*Las tres leyes de la termodinámica, ¿son cuatro?*), la primera y segunda ley de la termodinámica se centran en la conservación de la energía y en las dos formas fundamentales de su intercambio en los sistemas de muchas partículas. Dicha transferencia de energía, aunque es cuantitativamente simétrica, pierde su simetría en cuanto a su naturaleza cualitativa. Así, la energía de un sistema termodinámico puede alterarse, siempre que el sistema no esté aislado, a través de dos mecanismos generales conocidos como intercambio de energía por medio de trabajo e intercambio de energía por medio de calor.

James Joule demostró que calor y trabajo son formas cuantitativamen-



te equivalentes de transferencia de energía (1 cal = 4.8 kJ)<sup>1</sup> ya que, en las condiciones adecuadas, llevan al mismo cambio de energía interna del sistema. Sin embargo, fue Rudolf Clausius el primero en reconocer que ambas formas de intercambio de energía conllevan consecuencias muy diferentes en los sistemas, y que ello se debe al tipo de proceso al que se someta el sistema en cuestión.

Así, Clausius reconoció, a través del famoso teorema de Carnot, que los procesos inducidos sobre sistemas termodinámicos que no son realizados cuasiestáticamente<sup>2</sup> conllevan una producción de calor mayor en el caso cuasiestático. En otras palabras, todo el trabajo realizado por un sistema puede disiparse en calor, mientras que no todo el calor absorbido por el sistema puede reconvertirse en trabajo. En el caso de un proceso realizado de forma no cuasiestática, la eficiencia de conversión de calor en trabajo es todavía menor que en el caso cuasiestático. De esta forma, la famosa desigualdad de Clausius<sup>3</sup> introdujo así una noción nuclear en la teoría termodinámica, la idea de irreversibilidad. Un procesos irreversible es aquel que produce cambios irremediables o irrevertibles en el universo (sistema más entorno) una vez que han tenido lugar (ver figura 20.1). Los estudios de Clausius culminaron, por decirlo así, en la formalización de la desigualdad que lleva su nombre y que permite, para el caso de los procesos cuasiestáticos, en principio, definir una de las dos cantidades físicas fundamentales y originales que introduce la termodinámica en el estudio de los sistemas fisicoquímicos: la entropía. Ésta permite relacionar la idea de irreversibilidad contenida en la segunda ley, con una noción que refiere al sentido de la *transformación* marcada con el aumento en la entropía.

En los 50 años posteriores se discutió encarnizadamente la necesidad y significado de este nuevo concepto introducido por Clausius. Se negó y afirmó que la ley de entropía era una ley fundamental de la termodinámica, hasta que Max Planck en su libro sobre termodinámica argumentó de manera decisiva la necesidad de adoptar a la entropía y a la ley de entropía.

<sup>1</sup>No escapará al lector el hecho de que las calorías son la medida predilecta de los químicos para determinar la cantidad de energía almacenada o intercambiada por un sistema, mientras que los julios lo son para los físicos.

<sup>2</sup>Palabra que es una forma de decir infinitamente lento de forma enteramente equivalente al infinitesimalmente pequeño del incremento diferencial del cálculo diferencial.

<sup>3</sup>Para todo proceso cíclico,

$$\oint dQ/T \leq 0,$$

donde  $Q$  es el calor entrando en el sistema y  $T$  es la temperatura. Si el proceso es irreversible se cumple la desigualdad, y la igualdad si es reversible.

pía como un principio fundamental de ésta disciplina, es decir, como un axioma.

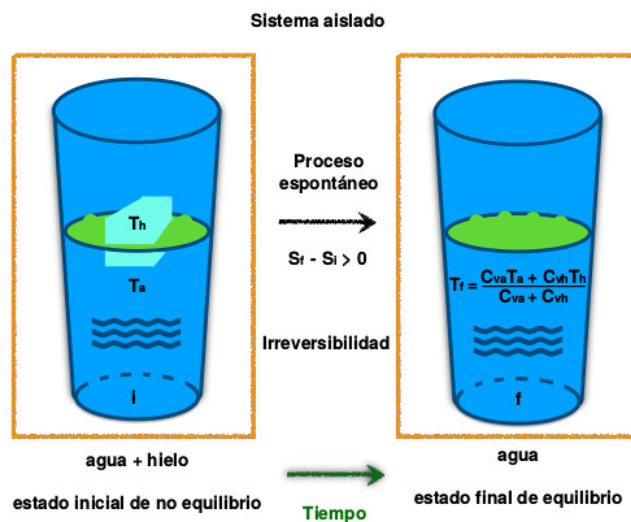


Figura 20.1: Ilustración del concepto de irreversibilidad.

#### HIPÓTESIS FUNDAMENTALES

El desarrollo histórico de la termodinámica diverge grandemente de la lógica de su contenido. Esto se debe a que los descubrimientos experimentales no ocurrieron de manera lineal y progresiva. Ligado a esto, la incertidumbre sobre la existencia de los átomos forzó, de alguna manera, a que la estructura lógico-matemática de la termodinámica heredara las formas y procedimientos de la mecánica analítica, que en aquel tiempo era el epítome de lo que una teoría física debe ser [1]. Así, las hipótesis fundamentales son la existencia de un sistema macroscópico o propiamente termodinámico<sup>4</sup>, así como la existencia de estados de equilibrio termodinámico. Estos últimos son describibles en términos de ciertas variables, denominadas de estado. Éstas vienen en pares conjugados (como en mecánica analítica las coordenadas canónicas), y el producto del cambio de una de ellas, la variable ex-

<sup>4</sup>Un sistema termodinámico se define por el tipo de energía que puede intercambiar con su entorno, y por ende por la naturaleza de las fronteras, lo cual permite reconocer las variables termodinámicas que lo pueden describir.

tensiva (la que depende de la cantidad de masa en el sistema) por el valor de la variable intensiva (que es independiente de la cantidad de masa), dan como resultado el trabajo intercambiado entre el sistema y sus alrededores.

Ante este panorama la pregunta decisiva es si puede formularse una versión de la teoría en la que las hipótesis antes mencionadas puedan relajarse. Resulta claro que la primera hipótesis no puede relajarse, pues es en sí misma la definición del sistema. Sin embargo, a lo largo del siglo XX y lo que va del siglo XXI ha sido mostrado que la segunda hipótesis que refiere a los estados de equilibrio no es tan fundamental como se consideró por mucho tiempo.

Equilibrio o no equilibrio, he allí la cuestión.

#### UN POCO DE HISTORIA

Un resumen de fechas y acontecimientos científicos puede ser de utilidad para hacerse una idea más adecuada del desarrollo de la teoría. La primera ley de la termodinámica fue enunciada por primera vez en su forma más o menos actual por Helmholtz en 1847 y por Clausius en 1850. La segunda ley de la termodinámica fue enunciada en 1851 por Kelvin y en 1854 por Clausius, como una inferencia a partir del famoso Teorema de Carnot (1829). Ambas definiciones son equivalentes aunque no se formulan de la misma manera. Es interesante notar, que la formulación de Clausius indica que el calor siempre fluye de los cuerpos calientes a los fríos y no a la inversa. Ésta es la esencia de la también famosa ley de Fourier para la conducción del calor<sup>5</sup>, que fue postulada entre 1807 y 1822 a través de una serie de trabajos que devinieron en la obra clásica: *Theorie Analytique de la Chaleur*<sup>6</sup>. Ese trabajo de Fourier dio inicio a la muy importante disciplina que hoy se conoce como Fenómenos de Transporte, la cual, alrededor de cien años más tarde, fue embebida en el marco teórico de la Termodinámica.

---

<sup>5</sup>El flujo de calor por unidad de área a través de una superficie es proporcional al negativo del gradiente de la temperatura.

<sup>6</sup>La historia sobre esta teoría es curiosa. Nos retrotrae a la muy cotidiana vivencia de todo investigador con ideas propias. Fourier propuso su teoría en un artículo que envió a la Academia Francesa en 1807. Los revisores de su trabajo fueron cuatro, los dos más notables Lagrange y Laplace, dieron una evaluación negativa, ya que recibieron mal el trabajo, particularmente por razones matemáticas (como el uso del método separación de variables que Fourier inventó para resolver el problema). El resultado fue, que el artículo de Fourier no se publicó. Sin embargo, la voluntad de Fourier le llevó a publicar por su propia cuenta la ya citada *Theorie Analytique de la Chaleur* en 1822, obra que ha pasado a ser un clásico de la física-matemática [2] y obra seminal indiscutible de toda la teoría de procesos de transporte.

ca de no-equilibrio propuesta por Ilya Prigogine, a la cual nos referiremos más tarde.

Una de las aportaciones fundamentales de la obra de Fourier fue el introducir la noción de flujo de calor y, por supuesto, ligarlo al negativo de la diferencia de temperatura. Su teoría explica que el proceso temporal básico que precede al establecimiento del estado de equilibrio termodinámico es la difusión, y que ésta es, a su vez, consecuencia de un proceso de transporte ya sea de masa, carga, energía o volumen. Además, es sobresaliente el que haya considerado que la temperatura de un sistema dado, por ejemplo una barra de metal en contacto con dos baños térmicos a dos temperaturas diferentes, es una función tanto del tiempo como del espacio. Dar por sentado esto fue un gran paso en el avance de la comprensión y la descripción de los sistemas termodinámicos, ya que contempla un panorama mucho más amplio que los estados de equilibrio.

La contribución teórica de Fourier a la comprensión de los fenómenos termodinámicos y de transporte de energía fue inmensa. Poco después de la publicación de la obra de Fourier, aparecieron en la literatura científica aportaciones que aún hoy en día resultan de fundamental importancia. Entre ellas podemos mencionar la Ley de Ohm que liga a la corriente eléctrica (flujo de cargas) con el voltaje aplicado (gradiente de potencial) en 1827 y la Ley de Fick para la difusión de masa en 1855. Otros efectos importantes relacionados con el transporte de energía eléctrica fueron los efectos Seebeck (1821) y Peltier (1834), gracias a los cuales pudo asociarse la idea de que una diferencia de temperatura puede producir una corriente eléctrica y viceversa. Estos efectos, que hoy se denominan efectos cruzados, fueron explicados en forma unificada por Kelvin en 1851 y constituyen la base de los termopares, instrumentos utilizados para medir la temperatura de un objeto a través de una corriente eléctrica.

Con esta brevísima reseña histórica, he pretendido mostrar que el desarrollo conceptual de las leyes termodinámicas no sólo no está desligado del “no equilibrio”, si se puede decir de esta manera, sino que depende esencialmente de él a través de la teoría de los procesos de transporte.

#### PROCESOS IRREVERSIBLES I: RECIPROCIDAD

Puede afirmarse que la teoría termodinámica se completó hasta cien años después de la aportación de Fourier, dado que más allá del estudio de los sistemas en equilibrio, fue hasta entonces que los procesos de transporte irreversibles se incorporaron de manera sistemática en la teoría. Esto suce-

dió en dos monumentales artículos de Lars Onsager (1931), que enunció una primera versión de la teoría termodinámica<sup>7</sup> de los procesos irreversibles de forma completamente general [2]. Resumir el contenido de dichos trabajos es difícil, sin embargo, a grandes rasgos, partiendo de la hipótesis de reversibilidad microscópica, Onsager demostró que los procesos irreversibles pueden acoplarse entre sí de tal manera que los coeficientes fenomenológicos (los coeficientes de transporte) de acoplamiento entre diversas causas son recíprocos. Un ejemplo de lo anterior se observa al afirmar que la corriente eléctrica inducida por una unión de dos metales diferentes a diferentes temperaturas tiene exactamente la misma constante de proporcionalidad que el flujo de calor producido por el paso de una corriente eléctrica a través de esa unión. Este es el efecto termo-eléctrico que Kelvin explicó de manera unificada en 1851. Esta importante igualdad se conoce como el Principio de Reciprocidad de Onsager, y es una de las bases fundamentales de la termodinámica fuera de equilibrio. Sin embargo, el mismo Onsager afirma que “el principio de reversibilidad microscópica es menos general que las leyes de la termodinámica”.

Sin embargo, es el análisis que presenta en el inciso 5 de su primer artículo sobre el principio de mínima disipación de energía el que fundamenta la teoría general. En este inciso propone una función disipativa en términos de lo que llamó fuerzas y flujos termodinámicos. Consideró que la tasa temporal de acumulación de calor producido por los procesos irreversibles en cuestión,<sup>8</sup> puede asociarse a lo que denominó tasa de producción local de entropía:  $Tds/dt$ . En esta ecuación  $s$  es la entropía y la derivada es temporal. De esta forma, Onsager determinó la tasa de disipación de energía libre usando el criterio general de la segunda ley, es decir, que la entropía de un sistema aislado debe incrementarse en todo proceso espontáneo. Los resultados de Onsager demostraron que la energía libre debe decrecer en todo proceso que respeta las constricciones naturales de cada energía considerada (Gibbs, Helmholtz, etc.).

## PROCESOS IRREVERSIBLES II: FLUCTUACIONES

En el mismo inciso 5, Onsager afirmó que, desde un punto de vista fundamental, sus resultados tienen “algún mérito”, pues son aplicables a sis-

---

<sup>7</sup>Onsager se refería a la teoría como cuasi-termodinámica.

<sup>8</sup>El ejemplo más claro de ésta se encuentra en el trabajo de Joule a través de la conocida relación para la potencia disipada por una resistencia eléctrica  $P_d$ , o calor de Joule:  $P_d = IV$ , donde  $I$  es la corriente eléctrica y  $V$  el voltaje.

temas aislados. Sin embargo, afirma, que una teoría más general aplicable a todos los procesos de transporte puede derivarse usando la teoría general de fluctuaciones termodinámicas, que tiene como relación fundamental la expresión de Boltzmann para la entropía en función de la probabilidad  $W$ :  $S = k_B \log W$ . Aquí  $k_B$  es la famosa constante de Boltzmann, como la denominó Planck.

En el mismo año de 1931, Onsager presentó resultados importantes a favor de esta afirmación [2]. Sin embargo, fue hasta 1953 que en un par de artículos junto con Machlup sobre la anunciada teoría general para los procesos irreversibles lineales, se concretó la Termodinámica de Procesos Irreversibles de Onsager, sobre las bases también generales, de la teoría de fluctuaciones de Einstein-Boltzmann [2]. En esta teoría, Onsager deja de lado la dependencia espacial de las variables termodinámicas, o en su caso específico, de las fluctuaciones de las variables termodinámicas, y se centra en describir la evolución temporal de las fluctuaciones en términos de lo que actualmente se conoce como proceso de Ornstein-Uhlenbeck<sup>9</sup>. Este proceso fue usado, en 1908, por Langevin para describir el movimiento Browniano de una partícula en un líquido simple, y es un método matemático de estudio muy poderoso por su gran generalidad.

Esta segunda teoría de Onsager es conceptualmente muy poderosa, ya que es aplicable a cualquier variable termodinámica que fluctúe. Sin embargo, está restringida a que dicha fluctuación debe ser tal que aún valga la proporcionalidad entre la fuerza que da lugar a la evolución del proceso (la diferencia de temperatura o de potencial químico, por ejemplo) y la variable misma. Es decir, debe seguir la hipótesis de regresión lineal de Onsager: la ecuación diferencial que describe la relajación al estado de equilibrio es lineal en la variable. No obstante, recientemente se ha mostrado que la teoría aún sigue siendo válida en el caso en que la regresión lineal no se cumpla [3]. El costo que se paga es que los procesos estocásticos subyacentes ya no son necesariamente aquellos de la ecuación de Ornstein-Uhlenbeck. Sin embargo, la teoría extiende de manera apreciable sus capacidades descriptivas y predictivas.

---

<sup>9</sup>El proceso de Ornstein-Uhlenbeck es, probablemente, el proceso fundamental de la teoría de procesos estocásticos. Consiste en considerar los efectos de fluctuaciones térmicas, cuyo origen es la naturaleza molecular de la materia, en una variable dada que tiende, de manera espontánea y según una ley lineal, a relajarse a un estado de equilibrio termodinámico.

## LA SEGUNDA OPCIÓN: LA AFINIDAD QUÍMICA

Sin embargo, la teoría de Onsager no es la única que describe los procesos irreversibles. Alrededor de 10 años después de la aparición de los primeros artículos de Onsager sobre el tema, Ilya Prigogine y lo que se conoce como la escuela de Bruselas, formularon una teoría termodinámica de procesos irreversibles local que dio cuenta, ahora sí de manera completamente general y sistemática, de la teoría de procesos de transporte. De hecho, la teoría contiene la descripción de la cinética de reacciones químicas, cuando éstas se restringen a sus pasos elementales. Esta segunda vertiente es más cercana a la teoría de Fourier por su descripción en términos de ecuaciones diferenciales parciales de las variables termodinámicas consideradas como campos. Las ideas de esta segunda teoría están enraizadas en la visión de De Donder, quien en 1923 introdujo la noción fundamental de afinidad química como diferencia de potenciales químicos, es decir, de energías libres de Gibbs por partícula o por mol.

En esencia, esta teoría da por supuesto que el cambio de la entropía de un sistema,  $dS$ , que realiza un proceso arbitrario puede escribirse como la suma de dos contribuciones, una debida a intercambios de entropía con los alrededores,  $d_e S$ , y otro debido a la producción de entropía (entendido en su momento como calor disipado) dada la presencia de flujos de variables extensivas, es decir, procesos de transporte,  $d_i S$ :

$$dS = d_e S + d_i S. \quad (20.1)$$

Esta relación es muy importante, ya que permite derivar de manera sencilla los principios de minimización de la energía<sup>10</sup>, así como la forma explícita de las ecuaciones de evolución espacio temporal de las variables termodinámicas que caracterizan al estado local del sistema durante el proceso, por ejemplo a través de la ecuación de difusión del calor. Es importante enfatizar que la primera consecuencia que se sigue de (20.1) es que para sistemas asilados donde no hay intercambio de energía ni de masa, se tiene  $d_e S = 0$ . En esta situación, la segunda ley de la termodinámica impone que la producción de entropía sea positiva definida:

$$d_i S > 0. \quad (20.2)$$

La derivación de las mencionadas ecuaciones de evolución se realiza a lo largo de los siguientes razonamientos, presentados aquí de manera es-

---

<sup>10</sup>Por ejemplo que, como es bien sabido en el caso de reacciones químicas se cumple  $(dG)_{T,P} = -T d_i S < 0$ .

quemática. Suponiendo de antemano que en cualquier instante de tiempo las variables termodinámicas son definibles en pequeños volúmenes de control del sistema macroscópico, entonces la ecuación de Gibbs puede escribirse de manera local en la forma que dictan las leyes y expresiones de la termodinámica clásica, es decir:

$$T dS = dU + y dX - \sum \mu dn, \quad (20.3)$$

donde  $dS$  está dado por (20.1) con  $T d_e S = dQ$ , de acuerdo con la definición tradicional [2]. Aquí,  $y$  es una variable intensiva conjugada a la variable extensiva  $X$  y  $\mu$  es el potencial químico conjugado al número de moles de sustancia,  $n$ . El cambio temporal de la ecuación (20.3), da como resultado una ecuación de evolución para el cambio de la entropía que está expresado en función del cambio de la energía interna,  $dU/dt$ , dictado por la primera ley, y el intercambio de masa, dictado por la ley de conservación de la masa,  $dn/dt$ . En esas expresiones locales es posible distinguir entre los flujos de origen externo  $J_e$  que atraviesan la frontera del sistema y los procesos internos, digamos  $J_i$ , relacionados con los procesos de transporte espontáneos al interior del sistema. Así, el exigir la positividad de la producción de entropía, (20.2), permite postular una serie de relaciones lineales<sup>11</sup> entre fuerzas termodinámicas o gradientes de propiedades intensivas,  $dy/dx$  (donde  $x$  es la posición), con sus flujos conjugados  $J_i = dX/dt$  en la misma forma de la ley de Fourier, que escrita en una dimensión toma la forma:

$$J_q = -\kappa \frac{dT}{dx}. \quad (20.4)$$

Aquí,  $\kappa$  es la conductividad térmica del material, un ejemplo de coeficiente fenomenológico. El signo menos indica que el flujo de calor  $J_q$  tiene lugar siempre de las zonas de alta temperatura a las zonas de baja temperatura, tal y como Clausius lo estableció en su formulación de la segunda ley en 1854. Según estos razonamientos, en el sentido de lo afirmado por Clausius, la ley de Fourier es una formulación de la segunda ley de la termodinámica. La fuerza termodinámica asociada al gradiente o a la diferencia de una variable intensiva, es la generalización de lo que De Donder llamó *afinidad termodinámica*.

<sup>11</sup>En la teoría hidrodinámica estas relaciones llevan el nombre de relaciones constitutivas, que no son más que las leyes de Fourier, Ohm, Fick y Newton para la viscosidad, por citar los ejemplos más ilustres.



## PERSPECTIVA ACTUAL

En la comunidad científica se considera que la descripción de los procesos irreversibles no termina con las teorías de Onsager ni, mucho menos quizás, Prigogine. Al contrario, las formulaciones originales hacen un énfasis (quizás excesivo) en la hipótesis o consideración de que las leyes propuestas son válidas cuando los sistemas se encuentran fuera del equilibrio, pero cerca de él. Sin embargo, el deseo de la comunidad es describir procesos irreversibles arbitrariamente alejados del equilibrio. Pese a que la restricción es rigurosamente válida sólo para la teoría de Onsager tal cual la formuló, no lo es necesariamente para la teoría de Prigogine.

En años recientes, ha habido diversos esfuerzos por generalizar la teoría irreversible lineal con el objetivo antes mencionado. El trabajo es arduo y hay una amplia diversidad de enfoques, desde macroscópicos hasta mesoscópicos. Como ejemplo del primero podemos mencionar la Termodinámica irreversible lineal extendida (TILE), que se desarrolló principalmente en los años 80 y 90 del siglo pasado y en la que científicos mexicanos liderados por el Prof. García-Colín contribuyeron de manera apreciable, por lo que existió lo que se llamó la Escuela Mexicana de la TILE.

Más recientemente se han desarrollado teorías termodinámicas que incorporan de forma explícita la noción de fluctuaciones. Entre dichas teorías se encuentra la Termodinámica mesoscópica de no-equilibrio formulada al final de los años 90 por Rubi, Mazur y Pérez-Madrid, en cuyo desarrollo han participado también investigadores mexicanos. Otro par de teorías termodinámicas a nivel mesoscópico son la Termodinámica estocástica principalmente desarrollada en Europa por los grupos de Seifert y Van den Broeck [4] y recientemente la Termodinámica irreversible de sistemas pequeños que generaliza la teoría de Onsager y se formuló a lo largo del último lustro en México [3].

## PARA SABER MÁS:

- P. Duhem, *La teoría física, su objeto y estructura*, Herder, Barcelona, 2009, 444 pp.
- D. Kondepudi e . Prigogine, *Modern thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures*, John Wiley and Sons, Chichester, 1999, 514 pp.
- I. Santamaría Hólek, *Termodinámica Moderna*, Trillas, México, 2014, 224 pp.

REFERENCIAS

- [1] P. Duhem y A. M. Riu, *La teoría física: SU objetivo y su estructura*, es. Herder Editorial, abr. de 2003.
- [2] I. Prigogine, *Introduction to thermodynamics of irreversible processes*, English. New York: Interscience Publishers, 1967.
- [3] I. Santamaría-Holek, *Termodinámica moderna: Teoría de no equilibrio con enfoque multidisciplinario*. México: Trillas, 2014.
- [4] «Stochastic Thermodynamics», en *Selforganization by Nonlinear Irreversible Processes: PROCEEDINGS of the Third International Conference Kühlungsborn, GDR, March 18–22, 1985*, ép. Springer Series in Synergetics, W. Ebeling y H. Ulbricht, eds., vol. 33, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1986, págs. 57-61.

## CUANDO LA MATERIA SE SOMETE A MUY ALTAS PRESIONES

*Claude Thions Chaudy\**

**El conocimiento de los fenómenos inducidos por altas y muy altas presiones proporciona información sobre la estructura de la materia en condiciones no alcanzables por otros métodos. Bajo altas presiones las propiedades mecánicas, químicas y estructurales de la materia se ven seriamente alteradas. Los enlaces químicos cambian de tal suerte que se pueden sintetizar nuevos materiales, obtener diamantes sintéticos a partir de carbono, obtener oxígeno metálico e hidrógeno metálico. Para producir las condiciones de alta presión necesarias se cuenta con dos métodos: la compresión estática, por medio de prensas y pistones, y la compresión dinámica inducida por ondas de choque. Finalmente una adecuada combinación de ambos métodos llevará a las muy altas presiones, como las encontradas en particular en astrofísica y geofísica.**

La física de altas presiones estudia el comportamiento de la materia en condiciones extremas de presión, entendiéndose por ello presiones por arriba de 10 mil atmósferas<sup>1</sup>(ver tabla 21.1). Claro está que no es lo mismo comprimir un gas, por definición altamente compresible, que comprimir un líquido o un sólido. Por ejemplo un cambio en 0.2 atmósferas sobre un gas provoca un cambio del volumen del orden de 20 %, pero para obtener una compresión de 20 % en un líquido se necesitan del orden de  $10^4$  atmósferas y para conseguir la misma compresión en un sólido se requerirán del orden de  $2 \times 10^5$  atmósferas. Dado que actualmente se pueden obtener en laboratorio presiones de varios miles de millones de atmósferas, no sólo los efectos de compresión serán muy notorios, en particular al reducir considerablemente las distancias interatómicas, sino que aparecerán fenómenos debidos a altas o muy altas temperaturas.

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

<sup>1</sup>1 atmósfera =  $1.013 \times 10^5$  Pa  $\approx$  1 bar (ver tabla 21.3).

$10^{30}$	Presión en el Centro de una Estrella Neutrónica
$10^8$	Presión en el Centro de Júpiter. (100 millones de atmósfera)
$10^6$	Presión en el Centro de la Tierra (3.4 millones de atmósferas)
$10^4$	Presión desarrollada por Prensas Industriales (10 000 atmósferas)
$10^3$	Presión en Fosas Marinas (11 mil atmósferas)
$10^1$	Presión en Automotores de Combustión (15 atmósferas)
$10^0$	Presión en una olla express
$10^0$	PRESIÓN ATMOSFÉRICA
$10^{-1}$	Sobre Presión de la sangre arterial en una persona
$10^{-6}$	Vacío obtenido por bombas mecánicas
$10^{-14}$	Mejor vacío obtenido en el Laboratorio
$10^{-20}$	Vacío Interplanetario

**Tabla 21.1:** Presión medida en atmósferas.

En este capítulo nos restringiremos a aspectos de alta presión en sólidos sin considerar los fenómenos de temperatura. Existen diferentes métodos para obtener estados de alta presión: por compresión estática, por compresión dinámica y mediante una combinación de ambas. Las presentaremos en este mismo orden.

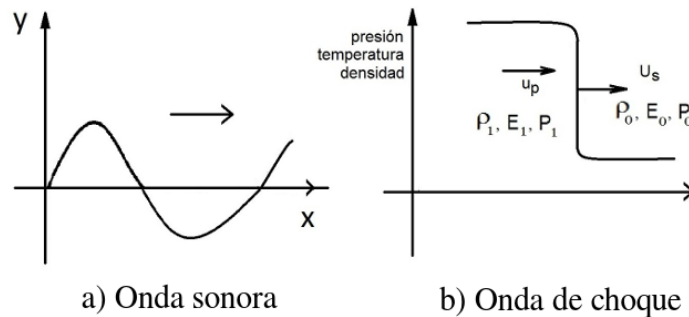
La obtención de alta presión estática se basa en la definición operacional de la presión:  $P = F/A$  donde  $F$  es la fuerza aplicada sobre un área  $A$ . Fue pionero en el desarrollo de la física de altas presiones estáticas P. W. Bridgman diseñando aparatos que intensifican la fuerza aplicada al tiempo que se va disminuyendo el área [1], como sucede por ejemplo en las prensas hidráulicas. Usando pistones que prensaban la muestra estudiada entre dos yunques, con o sin el uso de un líquido transmisor de la presión, llegó a producir del orden de 50 mil atmósferas. Mucho de su trabajo se enfocó en el diseño de yunques capaces de soportar los esfuerzos aplicados por medio de los pistones. Los yunques con los cuales obtuvo mejores resultados consistían de pequeñas protuberancias cónicas que sobresalían de pistones relativamente grandes. Cambiando tanto el diseño de las protuberancias como el material de las mismas, Bridgman llegó a obtener hasta 100 mil atmósferas. Con sus métodos la máxima presión alcanzable queda limitada por el flujo plástico o por el rompimiento de los yunques.

Con estos aparatos, operando entre 50 mil y 100 mil atmósferas ya es posible modificar las propiedades de la materia para fines específicos como la síntesis de nuevos materiales con característica predeterminadas útiles

en tecnología espacial o en blindajes; la síntesis de diamantes a partir de carbono con presiones del orden de 80 mil atmósferas y temperaturas del orden de mil grados; la obtención de oxígeno metálico con 960 mil atmósferas que lo vuelven superconductor.

Sin embargo, en 1978 H. K. Mao y P. M. Bell lograron alcanzar una presión estática, a temperatura ambiente, de 1.72 millones de atmósferas usando yunques de diamante tallados en forma cónica [2]. Desde entonces los aparatos que usan el diseño de Mao y Bell se llaman "celdas de diamante" y usan diferentes tipos de tallado del diamante para aumentar su resistencia. Todas las celdas de diamante usan una fuerza uniaxial aplicada a los yunques y un medio transmisor de la presión, que no cambie de estado durante el proceso, para obtener presiones hidroestáticas. Dicho medio puede ser líquido o gaseoso y se confina mediante juntas alrededor de la cámara entre los yunques. La presión no se transmite directamente a la muestra estudiada porque partes del aparato sufren deformaciones durante el proceso. Dado que no se puede conocer con precisión la fuerza aplicada, la presión se tiene que calibrar. Mao y Bell usaron como medidor de presión el corrimiento en la longitud de onda de la fluorescencia  $R_1$  de una pequeñísima cantidad de rubí introducida dentro del volumen ocupado por la muestra.

La alta presión dinámica se obtiene acelerando un proyectil a alta velocidad para que impacte frontalmente un blanco que contiene la muestra por estudiar. El impacto induce en el blanco una onda de choque, o sea una onda cuya velocidad de propagación es mayor que la velocidad del sonido en el material impactado.



**Figura 21.1:** a) La velocidad de propagación de una onda sonora en un medio dado es la constante que llamamos velocidad del sonido. b) La velocidad de propagación  $U_s$  de una onda de choque es siempre mayor que la velocidad del sonido en el medio y crece con la magnitud de la perturbación.

Dependiendo del tipo de cañon utilizado, la velocidad del proyectil puede llegar a ser de 10 a 12 km/s, induciendo en materiales sólidos presiones de decenas de gigapascales.

El frente de onda separa abruptamente el estado inicial del estado ya perturbado por el paso de la onda como se ve en las figuras 21.1a y 21.1b. Para acelerar el proyectil se usan o bien cargas explosivas o bien los “cañones de gas ligero”, entiéndese gas helio o hidrógeno; de estos últimos existen diferentes modelos uno de los cuales se muestra en la figura 21.2.

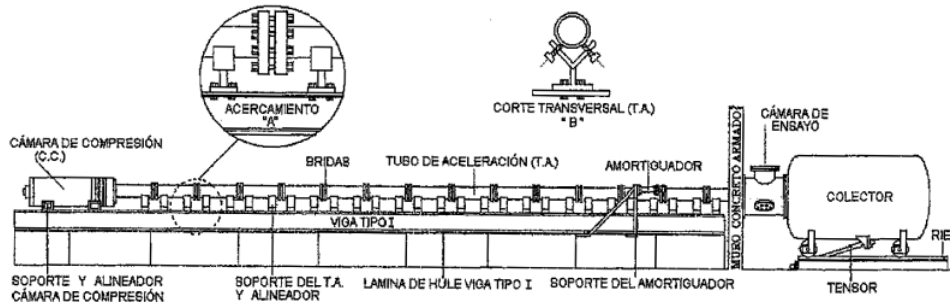


Figura 21.2: Modelo de un “cañon de gas ligero”.

El proyectil es acelerado a lo largo de un tubo por la expansión del gas inicialmente comprimido en una cámara y liberado repentinamente sobre la cara posterior del proyectil, que impactará el blanco colocado en el extremo del tubo. La presión inducida en el blanco por la onda de choque depende de la velocidad del proyectil así como del material impactado.

La onda de choque, en contraposición con la onda sonora, produce un arrastre de materia. Su tiempo de subida a máxima amplitud es del orden de nanosegundos. Se propaga dentro del material con velocidad  $U_s$  en microsegundos. En un sólido induce esfuerzos de compresión que rebasan el límite elástico del material; los efectos de rigidez se pueden despreciar y su comportamiento puede entonces ser aproximado por el de un fluido perfecto [3].

Independientemente de la manera mediante la cual se produce la onda de choque, el material alcanza un estado hidrodinámico y se pueden escribir las ecuaciones de conservación de la masa del momento lineal y de la energía interna bajo la forma

$$\begin{aligned} \rho_0 U_s &= \rho(U_s - u_p), & \text{conservación de la masa;} \\ P_H - P_0 &= \rho_0 U_s u_p, & \text{conservación del momento;} \\ E_H - E_0 &= \frac{1}{2}(V_0 - V)(P_H + P_0), & \text{conservación de la energía;} \end{aligned}$$

donde los subíndices cero se refieren al estado inicial no perturbado,  $\rho$  es la

densidad,  $P_H$  es la presión de choque,  $E_H$  es la energía interna y  $V = 1/\rho$  es el volumen específico. Estas ecuaciones son las llamadas ecuaciones de Rankine-Hugoniot [3]. Cuando la presión inicial es la presión atmosférica se puede despreciar  $P_0$  con respecto a  $P$ , y si  $E_0$  es la energía de referencia en el estado inicial  $E_0 = 0$ , las ecuaciones se reducen a

$$\begin{aligned} 1 - V/V_0 &= u_p/U_s, \\ P &= P_0 U_s u_p, \\ E &= \frac{1}{2} P (V_0 - V). \end{aligned}$$

De la ecuación para la energía se deduce que el incremento en energía interna por unidad de masa es exactamente igual a la energía cinética por unidad de masa.

La ecuación para la conservación de la energía se expresa en función de la presión  $P$  y del volumen  $V$ . En un plano, esta ecuación representa el lugar geométrico de los estados  $P, V$  alcanzados por la propagación de una onda de choque, a partir de un estado inicial  $P_0, V_0$ ; esta curva es la Hugoniot del material, en su representación más usual, aunque también pueden ser útiles los planos  $P - u_p$  y  $U_s - u_p$ . Se ha encontrado, experimentalmente que los parámetros cinemáticos de velocidad de choque y velocidad de partícula guardan entre si una relación lineal  $U_s = a + bu_p$  donde las constantes  $a$  y  $b$  son parámetros del material. Esta relación empírica es válida mientras no haya un cambio de fase del material. Para velocidades de partícula infinitesimalmente pequeñas el parámetro  $a$  es igual a la velocidad del sonido en el material.

Dado que el proceso de choque es tan rápido, del orden de micro o nanosegundos, no hay tiempo para que fluya calor entre el sistema y sus alrededores por lo que se puede asociar la Hugoniot con la adiabática de choque, a pesar de que el fenómeno en si es totalmente irreversible.

Supongamos que queremos obtener la Hugoniot del cobre de densidad inicial  $\rho_i = 8.93 \text{ gr/cm}^3$ . Colocaremos nuestro blanco (cobre) en la cámara de impacto (figura 21.1), y liberando la presión de la cámara de compresión aceleraremos un proyectil a lo largo del tubo de aceleración hasta que choque con el blanco induciendo una onda de choque en el cobre. Las cantidades medidas en cada experimento son: la velocidad  $v_p$  del proyectil un instante antes del impacto, y la velocidad de la onda de choque  $U_s$ . Realizado el experimento mediremos la densidad final  $\rho_f$  del blanco. Cada experimento nos proporciona un punto  $P, V$  de la Hugoniot. Si el choque es "simétrico" o sea la cabeza del proyectil es también cobre entonces  $u_p = v_p/2$ .

Con un ajuste por mínimos cuadrados a los valores experimentales de  $U_s$  y  $u_p$  determinaremos los coeficientes “ $a$ ” y “ $b$ ” de la relación lineal para obtener  $U_s = 3.94 \frac{\text{km}}{\text{s}} + 1.489u_p$ . Con ésta relación y la segunda ecuación de Hugoniot obtendremos la presión  $P_H = \rho_0 U_s u_p$ ; para tres disparos (tabla 21.2).

$U_s$ (km/s)	$u_p$ (km/s)	$P_H$ (kbar)
4.74	0.51	212
6.94	2.01	1240
9.87	4.02	3526

**Tabla 21.2:** Coeficientes de la Hugoniot de Cu para tres disparos.

Si el choque no es “simétrico” se colocará en la cabeza del proyectil un material cuya Hugoniot sea conocida y se aplicará el principio de que tanto la velocidad material  $u_p$  como la presión de Hugoniot  $P_H$  deben ser continuas através de una interfase; éste método es conocido como “acoplamiento de impedancias”.

Un caso interesante surge cuando no se puede ajustar sólo una recta a los valores de  $U_s$  y  $u_p$ , si no dos o más, con diferentes pendientes. Este hecho se asocia con la aparición de una transformación de fase del material de tal suerte que los parámetros de la relación lineal tendrán valores diferentes antes y después de la transición de fase.

Ahora bien para obtener una ecuación de estado de un sólido sometido a alta presión dinámica, hay que pasar de los datos de Hugoniot a datos termodinámicos. Para ello existen varias ecuaciones de estado, siendo la más usual la de Mie-Grüneisen [4] que supone que la presión de Hugoniot  $P_H$  es la suma de una presión interna más una presión térmica. Considerando los estados  $P, V$  de la Hugoniot se pueden conectar vía un camino termodinámico dado por una línea recta (línea de Rayleigh). Se obtiene la ecuación:

$$P_H(V) = P_s(V) + \gamma/V[E_H(V) - E_s(V)]$$

donde el subíndice “ $s$ ” se refiere a la isentropía,  $\gamma$  es el parámetro de Grüneisen  $\gamma = V(\frac{\partial P}{\partial E})_v$ ,  $P_s(V) = (\frac{\partial E}{\partial V})_s$  y  $E_s(V) = -\int_{V_0}^V P_s dV$  es la energía interna a lo largo del camino isentrópico. La temperatura a lo largo del camino isentrópico se puede expresar como [4]

$$T_s = T_i \exp \left[ - \int_{V_a}^{V_0} (\gamma/V) dV \right]$$



donde  $T_i - T_0$  es la isentropía ambiente,  $V_a = V_0$  es el volumen inicial y  $V_b = V_f$  es el volumen comprimido. La temperatura sobre la Hugoniot estará dada por  $V/\gamma(P_H - P_s) = -\int_{T_s}^{T_H} c_v dT$ . Para dar una idea de los valores de la temperatura sobre la Hugoniot en función de la presión tenemos los valores en la siguiente tabla.

$P$ (kbar)	Cobre (Cu)		Plomo (Pb)	
	$V/V_0$	$T$ (K)	$V/V_0$	$T$ (K)
100	0.940	334	0.865	504
500	0.814	719	0.693	2722
1000	0.737	1755	0.619	9218

Finalmente la combinación de presiones estáticas con presiones dinámicas permite alcanzar presiones de 10 a 100 TPa (terapascales), rango de presiones relevante en la ciencia planetaria y la geofísica. El método consiste en hacer incidir una onda de choque inducida por rayo láser sobre una muestra precomprimida dentro de una celda de yunques de diamante [5].

Dicho sea de paso, tan o más altas presiones han sido también obtenidas con explosiones nucleares realizadas bajo tierra, de las cuales hay poca información.

$1 \text{ Pa} = \frac{1\text{N}}{\text{M}^2} = 10 \frac{\text{dinas}}{\text{cm}^2}$
$1 \text{ bar} = 10^6 \frac{\text{dinas}}{\text{cm}^2} = 10^5 \text{ Pa}$
$1 \text{ atm} = 1.013 \times 10^5 \text{ Pa} \cong 1 \text{ bar}$
$1 \text{ psi} = 1 \frac{\text{lb}_f}{\text{in}^2} = 6.895 \times 10^3 \text{ Pa}$
$1 \text{ atm} = 14.7 \text{ psi}$

**Tabla 21.3:** Tabla de unidades.

REFERENCIAS

- [1] P. W. Bridgman, «Explorations toward the limit of utilizable pressures», *Journal of Applied Physics*, vol. 12, n.º 6, págs. 461-469, 1941.
- [2] H. K. MAO, «High-Pressure Physics: Sustained Static Generation of 1.36 to 1.72 Megabars», *Science*, vol. 200, n.º 4346, pág. 1145, jun. de 1978.

- [3] M. H. Rice, R. G. McQueen y J. M. Walsh, «Compression of Solids by Strong Shock Waves\*\*Work done under auspices of the U. S. Atomic Energy Commission.», en *Solid State Physics*, ép. Advances in Research and Applications, F. Seitz y D. Turnbull, eds., vol. 6, Academic Press, ene. de 1958, págs. 1-63.
- [4] T. J. Ahrens, «Equation of State», en *High-Pressure Shock Compression of Solids*, ép. High-Pressure Shock Compression of Condensed Matter, J. R. Asay y M. Shahinpoor, eds., New York, NY: Springer, 1993, págs. 75-113.
- [5] R. Jeanloz, P. M. Celliers, G. W. Collins y col., «Achieving high-density states through shock-wave loading of precompressed samples», *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 104, n.º 22, pág. 9172, mayo de 2007.

## TRANSICIONES DE FASE

Gerardo García Naumis\*

**En este capítulo se discuten los comportamientos colectivos de la materia y las transiciones que ocurren cuando estos surgen. Las transiciones entre comportamientos se explican mediante el paradigma del rompimiento de simetría, al cual se le agrega otro nuevo descubierto a finales del siglo XX: las fases topológicas. Ellas describen las fases cuánticas, como por ejemplo en el efecto Hall cuántico.**

*“Pues ¿qué os pudiera contar, Señora, de los secretos naturales que he descubierto estando guisando? Veo que un huevo se une y frie en la manteca o aceite y, por contrario, se despedaza en el almíbar; ver que para que el azúcar se conserve fluida basta echarle una muy mínima parte de agua en que haya estado membrillo u otra fruta agria; ver que la yema y clara de un mismo huevo son tan contrarias, que en los unos, que sirven para el azúcar, sirve cada una de por sí y juntos no. Por no cansaros con tales frialdades, que sólo refiero por daros entera noticia de mi natural y creo que os causará risa; pero, señora, ¿qué podemos saber las mujeres sino filosofías de cocina? Bien dijo Lupericio Leonardo, que bien se puede filosofar y aderezar la cena. Y yo suelo decir viendo estas cosillas: Si Aristóteles hubiera guisado, mucho más hubiera escrito.”<sup>1</sup>*

Este genial párrafo de Sor Juana Inés de la Cruz contiene varios niveles de lectura. Uno es el biográfico; nos describe sus inclinaciones científicas y con ello nos refrenda el derecho de las mujeres a pensar sobre los misterios del universo. En otro nivel habla de la importancia de realizar experimentos para entender la naturaleza. Para los fines de este capítulo, nos es relevante retomar sus observaciones sobre lo que sucede al realizar mezclas. Sor

---

\*Departamento de Sistemas Complejos, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

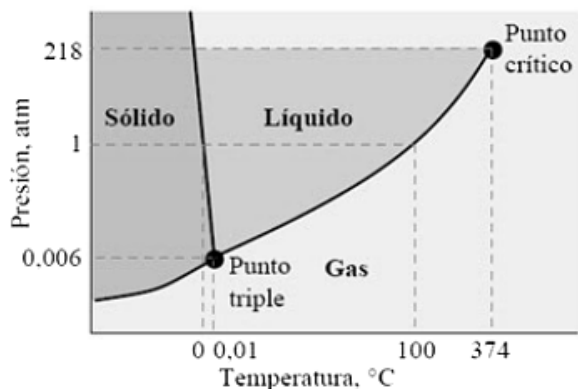
<sup>1</sup>Sor Juana Inés de la Cruz, en “Respuesta de la poetisa a la muy ilustre Sor Filotea de la Cruz.”

Juana nos indica por ejemplo que el azúcar puede ser fluída o sólida, remitiendo esto a la idea de fase y a la posibilidad de pasar de una a otra. Ello es justamente el tema de este capítulo. Mas aún; Sor Juana nos habla sobre dos temas cuyo verdadero impacto se ha dejado sentir sólo en los últimos 50 años: los fluidos complejos y la materia blanda. En este capítulo hablaremos de cómo aborda la física las transiciones de fase (TDF) y veremos como a fines del siglo XX se descubren nuevos tipos de ellas.

Sor Juana se refiere a un cambio claro en una propiedad física del azúcar, su fluidez, la cual está dictada por la rigidez mecánica del material. Un ejemplo muy familiar, tomado también de la cocina, es el del agua. A la presión atmosférica se vuelve vapor a los 100 °C. El agua se volverá sólida a los 0 °C. Al variar la presión, las temperaturas de ebullición y congelamiento varían. Toda esta información puede recogerse en un diagrama (ver figura 22.1), donde se indican las fases que toma el sistema en función de las condiciones externas impuestas a éste, en este caso, la presión y temperatura. Durante estos cambios de fase aparecen discontinuidades de algunas magnitudes termodinámicas, como en la densidad o los calores específicos. Además pueden existir puntos donde coexistan las fases o donde se termine una curva que separe las fases. El punto triple del agua es un ejemplo de lo primero. Allí conviven el agua con el hielo y vapor. La vida en la Tierra es posible por ser las condiciones de presión y temperatura cercanas a este punto. De la figura 22.1 vemos también que existe un punto llamado crítico donde deja de distinguirse el gas del líquido.

Si pensamos en otras propiedades físicas de las sustancias como podrían ser su naturaleza magnética (ferromagnética, antiferromagnética, paramagnética, diamagnética), de conducción electrónica (dieléctrico, metal, semiconductor, superconductor), ordenamiento atómico, etc., los diagramas de fase pueden ser mucho mas complejos. La historia se complica aún mas cuando, como Sor Juana, mezclamos sustancias. Las concentraciones de cada componente en la mezcla constituyen nuevas variables con las cuales se obtienen nuevas fases. Pongamos otra vez un ejemplo de la cocina virreinal. Alexandro de Humboldt, en su *“Ensayo Político sobre el Reino de la Nueva España”*, describe como los arrieros bajaban hielo de los glaciares volcánicos para elaborar nieves de diversos sabores. Para hacerlos se vertía jugo de frutas con agua en una cubeta, poniendo a su vez esta dentro de otra cubeta externa de diámetro mayor. El espacio entre ambas cubetas se rellenaba con una mezcla de hielo y sal. Luego se giraraba unas pocas veces la cubeta interna, resultando en que el jugo de frutas con agua se congelaba casi instantáneamente, produciendose así la nieve. La razón de esto es

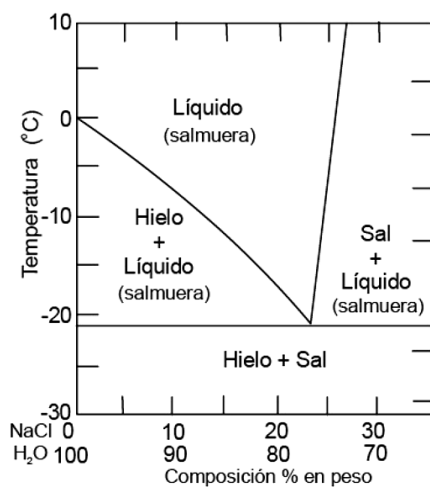
que, si observamos el diagrama de fases de la figura 22.2, la sal disminuye la temperatura de fusión del hielo. Así, la mezcla de hielo y sal se vuelve inestable a  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$  por lo cual absorbe calor del agua con jugo para “intentar” derretirse. El calor que libera el agua con jugo provoca que éstos se congelen produciendo la nieve.



**Figura 22.1:** Regiones que indican las fases del  $\text{H}_2\text{O}$  dadas las condiciones externas de presión y temperatura. Las líneas sólidas representan condiciones donde ocurren las TDF. En esas condiciones se observa la coexistencia de dos o más fases. Nótese que existe un punto llamado triple donde coexisten el hielo, agua y gas. Además hay un punto llamado crítico donde se termina la línea de ebullición del agua. Arriba de él no hay distinción entre gas y líquido; se le conoce como fluido supercrítico. El diagrama está simplificado; el hielo presenta 18 fases con diferentes simetrías.

En su texto, Sor Juana habla de mezclar sustancias que tienen diferentes interacciones entre ellas. Un ejemplo es el agua y el aceite. Normalmente se separan sin mezclarse; pero puede ser que mediante algún tercera sustancia, como el jabón, se puedan mezclar. El secreto es que las moléculas de la tercera sustancia tengan diferentes terminaciones. Un tipo de terminación atrae a la primera sustancia y la otra terminación atrae a la segunda sustancia. En el caso del jabón, las moléculas tienen una terminación soluble en grasas (liposoluble) y otra soluble en agua (hidrosoluble). La mayonesa es una emulsión donde se logra este efecto. Los diagramas de fase resultantes son muy complicados y se les conoce como fluidos complejos. Además, si seguimos los pasos de Sor Juana en la cocina y nos fijamos en otras cosas como la cerveza, el café capuchino o las gelatinas, podremos observar tipos exóticos de fases como las espumas o los geles. Estas no son ni líquidas, ni sólidas ni gaseosas, sino que son fases enteramente diferentes.

Para entender toda la fenomenología descrita debemos desmenuzar el concepto de fase de la materia. Microscópicamente la materia está formada por muchas entidades, tales como átomos o moléculas, las cuales interactúan entre sí mediante fuerzas. Aunado a esto, existen restricciones impuestas desde el exterior del sistema, como pueden ser la presión o temperatura. Resultado de todas estas interacciones y restricciones aparecen *comportamientos colectivos*, conocidos también como *fenómenos emergentes*. En este sentido, la materia constituye lo que se le llama un *sistema complejo*. Un fase corresponde entonces a la existencia de uno o mas comportamientos colectivos específicos, los cuales generalmente pueden ocurrir para varias combinaciones de los parámetros externos. Retomando el caso del agua, las fases fluidas tienen la propiedad colectiva de no resistir esfuerzos de corte.



**Figura 22.2:** Diagrama de fases para sal disuelta con agua en función de la temperatura y proporción en peso de sal diluída (a presión de 1 atmósfera). Hay regiones donde coexiste el hielo y la salmuera (agua con sal). Para un 23 % de sal en masa y una temperatura de fusión de  $-21$  °C, el sistema se comporta como una sustancia pura ya que no se segrega el hielo con salmuera. Esta es la mínima temperatura donde puede tenerse líquida a la salmuera y se le conoce como punto eutéctico. diagramas análogos se obtienen para aleaciones metálicas, vidrios, fluidos complejos, etc.

Hay dos aspectos importantes al tratar las fases, una consiste en estudiar la termodinámica, la otra en utilizar un enfoque microscópico basado en la estadística para entender de donde surgen las variables macroscópicas y las relaciones entre ellas. Podemos ver aquí como la física estadística

ca es un muy exitoso proceso de renormalización de grados de libertad, es decir, empezando con aproximadamente  $10^{23}$  grados, éstos se reducen a unas pocas combinaciones entre ellos, como sacar promedios o desviaciones cuadráticas, identificadas después con variables macroscópicas tales como temperatura, energía interna, etc.

La termodinámica provee herramientas invaluable para clasificar y predecir diversas características de las TDF. Dada la brevedad de este texto y la intención de este libro, no abordaremos aquí estos aspectos que pueden consultarse en cualquier referencia de termodinámica básica. Sólo recordaremos algunos elementos claves. El primero es la clasificación de las TDF según el orden de la derivada del potencial termodinámico de Gibbs que por primera vez presente una discontinuidad. Las transiciones de primer orden presentan una discontinuidad en la primera derivada. La transiciones de fluidez son generalmente de primer orden porque involucran discontinuidades en la densidad, siendo ésta la inversa de la primera derivada de la energía libre respecto a la presión. Estas transiciones involucran un calor latente, es decir, la energía suministrada en forma de calor se utiliza para el cambio de fase y entonces la temperatura permanece constante durante el proceso. Las transiciones de segundo orden exhiben una discontinuidad en la segunda derivada de la energía libre, siendo la primera derivada continua. Ejemplos de ellas son las transiciones entre superfluidos, de metal a superconductor y la ferromagnética. Se caracterizan por tener respuestas divergentes ante perturbaciones externas así como correlaciones de variables que decaen como una ley de potencias con la distancia. Otro aspecto que nos provee la termodinámica es la predicción de características generales de las TDF, como por ejemplo el número máximo posible de fases en coexistencia (regla de las fases de Gibbs), la derivada de las curvas de coexistencia de fases (ecuación de Clausius-Calpeyron), los criterios de estabilidad de las fases, etc.

Hasta aquí hemos mantenido en suspenso la razón por la cual ocurren las transiciones de fase. En realidad el paradigma existente es relativamente sencillo de entender. Se trata de una competencia entre orden y desorden. Cuando la temperatura es alta, los sistemas tienden a permanecer desordenados dado que los átomos o moléculas tienen mucha energía cinética. A medida que se baja la temperatura, domina la energía potencial que favorece el orden. Esta tensión entre orden y desorden queda de manifiesto al analizar la estructura de la energía libre. Imaginemos el caso sencillo de calentar un sistema manteniendo constante la presión. De acuerdo a la termodinámica, dado que la presión es constante, el sistema tendrá como fase

estable la que minimice la energía libre de Helmholtz. Esta energía, denotada por  $F[T, M]$ , viene dada por,

$$F[T, M] = U[M] - TS[M]$$

siendo  $T$  la temperatura,  $U[M]$  la energía interna y  $S[M]$  la entropía. La  $M$  entre paréntesis cuadrados es una etiqueta para las posibles configuraciones del sistema. Inmediatamente notamos que si  $T = 0$ , la energía libre es  $F[M] = U[M]$ . Esto indica que los estados observados del sistema serán los que minimicen la energía interna. Pero en general esa minimización se logra ordenando el sistema. Por otra parte, si crece  $T$ , eventualmente el término  $-TS[M]$  dominará a  $U[M]$ . Así,  $F[M] = -TS[M]$  y dado el signo menos de la energía libre,  $F[M]$  se hará mínimo para estados  $M$  de entropía máxima (o de máximo desorden).

Dado que fases diferentes implican cambios en el orden interno, es claro que se deba buscar una manera de clasificar los tipos de orden. La manera natural de hacerlo es mediante el estudio de las simetrías. Pensemos en un gas dentro de un tanque. Las moléculas podrán visitar todos los puntos del espacio dentro del tanque. En este sentido, todos los puntos así como las direcciones del espacio son equivalentes. Al bajar la temperatura el gas se solidifica y las moléculas se sitúan en posiciones fijas dentro de un cristal. Entonces los puntos del espacio dejan de ser equivalentes dado que en muchas regiones no serán observadas moléculas; la simetría translacional y rotacional se rompe.

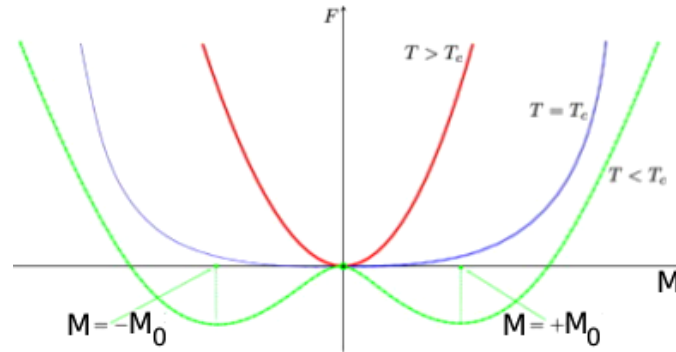
Así llegamos a una de las ideas centrales de las TDF; estas se caracterizan y clasifican por las simetrías que rompen. Atendiendo a esta idea, una vez que se localiza la simetría rota, puede utilizarse un parámetro, llamado de orden, que mide el grado de simetría de una y otra fase. Hacemos entonces que la variable  $M$ , usada para etiquetar estados en  $F(T, M)$ , sea el parámetro de orden. Existe un teoría debida a L. D. Landau que permite describir *cualquier transición de segundo orden* usando esta idea, y con algunas precauciones, puede ser aplicada a transiciones de primer orden. Landau produjo una energía libre fenomenológica basada en que el parámetro de orden es pequeño cerca de la transición y por lo tanto puede realizarse una expansión en series de potencias del mismo. Como ejemplo podemos tomar la transición de ferromagnetismo a paramagnetismo, es decir, de una fase con magnetización espontánea a una fase sin magnetización (en ausencia de campo magnético externo). En este caso el parámetro de orden  $M$  es la magnetización, obtenida de promediar todos los momentos magnéticos de los átomos. Desarrollando en serie de Taylor y tomando en cuenta algu-



nas consideraciones de simetría así como la ausencia de campo externos, la energía libre  $F[T, M]$  tiene la siguiente forma,

$$F[T, M] = a(T - T_c)M^2 + bM^4$$

siendo  $a$  y  $b$  dos parámetros de la teoría, ambos positivos.  $T_c$  es la temperatura de la transición de fase. En efecto, como se ve en la figura 22.3, si se grafica a  $F[T, M]$  para  $T > T_c$ , los términos cuadráticos y cuárticos tienen el mismo signo y  $F[T, M]$  tiene su mínimo para  $M = 0$ . Para  $T < T_c$  el término cuadrático es negativo y aparecen dos mínimos,  $M_0$  y  $-M_0$ , ambos distintos de cero, indicando así la aparición de magnetización espontánea. Es importante notar que hay dos mínimos. Un sistema real “escogerá” uno de ellos debido a fluctuaciones rompiendo entonces la simetría.



**Figura 22.3:** Teoría de Landau para TDF de segundo orden. Aquí se grafica la energía libre de Helmholtz  $F[T, M]$  en función del parámetro de orden  $M$  para tres temperaturas. Para  $T > T_c$ , el mínimo de  $F[T, M]$  está en  $M_0 = 0$ , mientras que para  $T < T_c$  aparecen dos mínimos. Ambos tienen la misma energía libre. El sistema “escoge” uno de ellos por alguna fluctuación térmica y rompe entonces la simetría. Si la simetría rota es continua, aparecen modos de baja frecuencia llamados de Nambu-Goldstone.

Otra característica es que la teoría indica la variación del parámetro de orden con  $T$ , i. e., la posición de los mínimos con  $T$ . Se obtiene que  $M_0(T) = 0$  si  $T > T_c$ , y  $M_0(T) = (a/2b)^\beta (T_c - T)^\beta$  para  $T < T_c$ .

El valor del exponente es  $\beta = \frac{1}{2}$ . Este es nuestro primer encuentro con los llamados exponentes críticos. Indican el escalamiento de las propiedades del sistema al acercarnos a la transición. Su estudio es en sí mismo un tema de importancia capital no sólo en la termodinámica sino también para sistemas complejos. El valor  $\beta = \frac{1}{2}$  es en general una característica de las TDF de segundo orden. No sólo se observa en sistemas magnéticos sino

en muchos otros como en la transición de metal a superconductor. La teoría no es cuantitativamente correcta si las fluctuaciones térmicas son fuertes, como ocurre en una dimensión ( $1D$ ) y dos dimensiones ( $2D$ ). Ello requiere técnicas más avanzadas como el grupo de renormalización o la hipótesis de escalamiento.

Una pregunta importante es por qué la teoría de Landau es más sencilla de aplicar para transiciones de segundo orden. La respuesta tiene que ver con la variación de los parámetros de orden al atravesar la transición. En las de segundo orden, el parámetro de orden es continuo con la temperatura, como en el caso visto anteriormente. Ello garantiza que el parámetro sea pequeño cerca de  $T_c$  y de ahí se sigue el desarrollo en serie de potencias. Puede demostrarse que este procedimiento es enteramente análogo a realizar una aproximación llamada de campo medio, donde cada integrante del sistema contribuye a generar un campo efectivo, el cual a su vez afecta a cada elemento. En cambio para las transiciones de primer orden, el parámetro de orden sufre un salto y no puede garantizarse su pequeñez. Cada caso particular requiere entonces un cuidadoso análisis, usualmente guiado por algún campo medio efectivo.

El rompimiento de simetría implica la aparición de excitaciones de baja energía cuyas longitudes de onda tienden a infinito. La razón física es sencilla de entender; como el Hamiltoniano tiene una simetría continua, pueden realizarse excitaciones que varían muy lentamente respecto a ella y por lo tanto tendrán poca energía. Estos modos se les llama de *Nambu-Goldstone*. Los fonones acústicos, los cuales son vibraciones cuantizadas de baja frecuencia en los sólidos, corresponden a los modos de Nambu-Goldstone asociados al rompimiento de la simetría traslacional. Hay muchos otros ejemplos como los magnones o plasmones. Este mecanismo se extiende a otras ramas de la física. Citemos que los modos de Nambu-Goldstone del campo electromagnético son los *fotones* y desde luego el campo de Higgs da lugar al famoso *bosón de Higgs*. El mecanismo de Higgs explica justamente el proceso de creación de masa como un rompimiento espontáneo de simetría.

Menos conocida es la relación entre modos de Nambu-Goldstone y la rigidez de un sistema. En general, por cada simetría continua rota aparece una nueva rigidez, caracterizada esta por una constante elástica asociada. El papel de esta rigidez es justamente evitar la destrucción del nuevo orden debido a las fluctuaciones térmicas. Las TDF donde se revela con mayor claridad este hecho es en las de fluidez, ya que como vimos anteriormente los fluidos se diferencian de los sólidos por su rigidez.

Tal y como estaba el paradigma del rompimiento de simetrías durante gran parte del siglo XX se creía imposible que pudieran existir TDF en sistemas bidimensionales y unidimensionales. Tampoco parecía posible tener sistemas ordenados bidimensionales con interacciones de corto alcance. Ello se debe a que si se estudia la mecánica estadística de estos sistemas, el desorden térmico tiene un efecto mucho mayor destruyendo la posibilidad de orden. Pensemos en fichas de dominó paradas en fila. Al tirar una de ellas, todas las otras se derrumban. De acuerdo a este paradigma, resultaba imposible concebir una transición de fase de un sólido hacia un superconductor o de un líquido hacia un superfluido en  $2D$ . Sin embargo, a fines de los años sesenta del siglo XX existían evidencias de estas transiciones. Por ejemplo se había observado una transición hacia un superfluido en superficies delgadas de  $\text{He}_4$  líquido. Otra evidencia eran las simulaciones computacionales con discos duros en  $2D$ . Ellas indicaban una transición de fase pero con las computadoras de la época resultaba imposible dilucidar si realmente era un efecto que pudiera subsistir en el límite termodinámico. Esto sólo pudo lograrse hasta el año 2015, cuando finalmente el sistema se escaló de manera que la transición fuera resuelta sin ambigüedad. La situación puede resumirse en que los hallazgos indicaban una contradicción con el paradigma de TDF y rompimiento de simetría.

Entonces D. Thouless y el joven J. M. Kosterlitz comenzaron a trabajar en el problema. Su guía conductora era abordar la superfluidez con un modelo de espines llamado  $XY$ . En él los espines están anclados sobre los sitios de una red cuadrada, pudiendo girar a cualquier ángulo. Existe una interacción  $J$  de cada espín con sus primeros vecinos en la red. La energía de cada configuración viene dada por su Hamiltoniana,  $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$ , siendo  $\theta_j$  el ángulo que forma el espín del sitio  $j$  con el eje  $x$  y la suma se extiende a todas las parejas de vecinos.

Puede demostrarse que este modelo es análogo al de un superfluido. La primera tarea de Kosterlitz y Thouless fue demostrar que las excitaciones de los espines forman vórtices, es decir, son una especie de "huracanes" donde los espines giran alrededor de una singularidad. Lo interesante de estas excitaciones es que no hay una dirección privilegiada del espacio, sino sólo puntos donde hay singularidades del parámetro de orden. Después, Kosterlitz y Thouless demostraron que los vórtices se apareaban a bajas temperaturas, existiendo una temperatura arriba de la cual los vórtices se desapareaban. Lo interesante de la transición es que no rompía ninguna simetría. Mas bien se asocia al apareamiento de las singularidades llamadas *defectos topológicos*. En su aparición es fundamental considerar las condiciones de

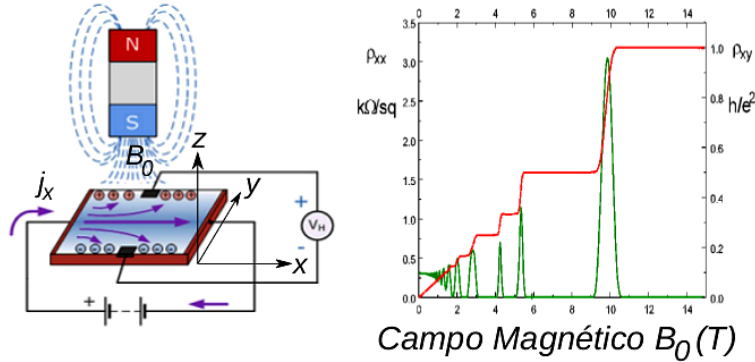
frontera; sólo el sistema finito presenta estas singularidades. El nombre de topológico viene en parte de ello, como veremos a lo largo del capítulo.

Actualmente, esta transición se conoce como de Kosterlitz-Thouless, y se considera el inicio del estudio de las TDF topológicas, razón por la cual les fue otorgado el Premio Nobel de Física 2016 (junto a Haldane quien aplicó estas ideas a sistemas magnéticos). Al mismo tiempo, el trabajo de Kosterlitz-Thouless abrió la brecha necesaria para empezar a romper el paradigma de la ausencia de TDF en  $2D$ . Eventualmente el paradigma se acabó de romper con el descubrimiento del grafeno. Este material está formado por átomos de Carbono ordenados en un arreglo geométrico similar a la estructura de un panal de abeja con la particularidad de tener un sólo átomo de espesor. Su descubrimiento por Geim y Novoselov les valió el Premio Nobel de Física 2010. El premio fue otorgado en un tiempo récord, menos de 10 años. Las razones son múltiples; por un lado rompió el paradigma teórico existente, por el otro resultó tener propiedades físicas sobresalientes que le han merecido el título del material maravilla. Además marcó el camino hacia el descubrimiento de otros materiales en  $2D$  como el fosforeno, siliceno, dicalcogenuros de metales de transición, etc. Estos materiales presentan una gama enorme de comportamientos susceptibles de ser aplicados en diversas tecnologías.

El estudio del modelo  $XY$  llevaría a Thouless a otro problema relevante que no había sido entendido a mediados de los años setenta del siglo XX. Era el llamado efecto Hall cuántico. Clásicamente se puede describir como la deflexión que sufre una corriente eléctrica en una lámina de metal cuando ésta se somete a un campo magnético uniforme perpendicular al plano de la lámina. Viendo la figura 22.4, consideremos primero el caso con campo eléctrico sin campo magnético. Al aplicar un campo eléctrico  $E_x$  en la dirección  $x$ , aparece en la misma dirección una densidad de corriente ( $j_x$ ) dada por  $j_x = \sigma_{xx}E_x$  donde  $\sigma_{xx}$  es la conductancia y su inverso la resistividad  $\rho_{xx} = 1/\sigma_{xx}$ . Cuando se enciende un campo magnético uniforme  $B_0$  en la dirección  $z$ , las cargas son deflectadas por la fuerza de Lorentz en la dirección perpendicular a los campos  $E_x$  y  $B_0$ . Se produce entonces un voltaje  $V_H$  en la dirección perpendicular al campo eléctrico (ver figura 22.4). A este efecto se le conoce como Hall. La corriente perpendicular al campo eléctrico viene dada por  $j_y = -\sigma_{yx}E_x$ , donde  $\sigma_{yx}$  es la llamada conductancia de Hall; su inversa es la resistividad de Hall  $\rho_{xy} = 1/\sigma_{yx}$ .

Landau fue el primero en estudiar este problema desde un punto de vista cuántico para un gas de partículas libres cargadas en  $2D$ , reduciéndolo al problema de un oscilador cuántico unidimensional. Los niveles energé-

tivos  $E$  están cuantizados y vienen dados por  $E = (n + 1/2)h\nu$ , donde  $n$  es un número entero,  $h$  es la constante de Planck y  $\nu$  es una frecuencia, conocida como de ciclotrón, dada por  $\nu = 2\pi eB_0/m_e$ , siendo  $e$  la carga del electrón y  $m_e$  su masa. A estos estados cuánticos se les conoce como niveles de Landau.



**Figura 22.4:** Panel izquierdo: dispositivo experimental para observar el efecto Hall clásico. Se coloca un metal sometido a un campo magnético uniforme, representado aquí por un imán. Al aplicar un campo eléctrico en la dirección  $x$  aparece una corriente. Las cargas se deflecan y aparece un voltaje de Hall  $V_H$  en una dirección perpendicular. Panel derecho: resistividades en las direcciones  $x$  y  $y$  en función del campo magnético aplicado medido en Teslas para el efecto Hall cuántico. Los picos corresponden a  $\rho_{xx}$  mientras que la curva con saltos y mesetas corresponde a  $\rho_{xy}$ . Las mesetas tienen una altura dada por  $\rho_{xy} = 1/\sigma_{yx} = 1/(C_r e^2/h)$ .

A principios de 1970, D. Hofstadter aborda en su tesis doctoral el mismo problema pero asumiendo cargas en un cristal  $2D$ . Hofstadter se dió cuenta que había otro nuevo parámetro dado por la distancia interatómica  $a$ . Ello hacía que hubiera una competencia entre el flujo magnético debido al campo en una celda unitaria, a saber  $B_0 a^2$ , y el flujo magnético cuántico  $h/e^2$ . Hofstadter logró mapear el problema a una ecuación análoga a la de osciladores unidimensionales clásicos acoplados. La ecuación contenía como parámetro fundamental a la razón entre flujos magnéticos  $\Phi = B_0 a^2/(h/e^2)$ . Para campos poco intensos, donde el reticulado del cristal no es importante, Hofstadter logró recuperar los niveles de Landau. La ecuación era periódica cuando  $\Phi$  era un número racional, y no periódica en caso contrario. Se recurrió entonces a una solución numérica. En la figura 22.5 se muestra el resultado para el espectro de energías  $E$  en función de  $\Phi$ . Puede verse su naturaleza autosimilar. El momento del descubrimiento no pudo ser mas

apropiado; en ese entonces se estaba desarrollando la teoría de fractales y caos. Este fractal se conoce como “*la mariposa de Hofstadter*”; fue el primero descubierto en el estado sólido.

Los problemas de Landau y Hofstadter se consideraban imposibles de observar. La primera razón es que no existían sistemas bidimensionales como los requeridos y la segunda es que tal y como estaba la teoría, se predecía que los sistemas eran aislantes. Además, en el caso de Hofstadter la fractalidad sería observable sólo con campos demasiado intensos para los obtenidos en la realidad.

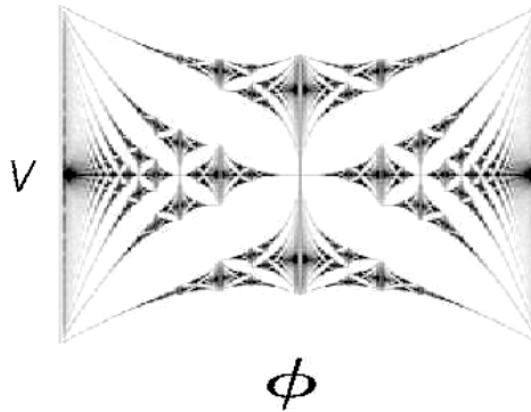
Sin embargo, en 1980 K. von Klitzing midió la cuantización de los niveles de Landau usando un transistor de efecto de campo metal-óxido-semiconductor (MOSFET). La idea fue lograr un sistema efectivo bidimensional. Como se muestra en la figura 22.4, se encontró que la conductancia estaba cuantizada, es decir,  $\sigma_{yx} = C_r(e^2/h)$  donde  $C_r$  es un número entero. Este descubrimiento le valió el Premio Nobel de Física en 1985 y actualmente tiene muchas aplicaciones, la mas obvia es medir la relación entre las constantes fundamentales  $e$  y  $h$ .

Se reconoció así que el problema producía un diagrama de fases, dado que el sistema podía tener conductancias cuantizadas bajo diferentes variables externas al sistema, en este caso los campos magnéticos y eléctricos aplicados. Estas conductancias presentaban discontinuidades entre diferentes regiones de parámetros. Esto lleva a la idea de *fases cuánticas*. La temperatura no controla las TDF cuánticas, sino que es el cambio de algún parámetro como los campos externos o una concentración de dopaje químico. Una vez mas, las TDF se deben a la competencia de dos mecanismos. Por un lado, si bien los electrones son partículas puntuales, sus estados ocupan cierto espacio. Clásicamente, un electrón bajo un campo magnético gira en un círculo de Larmor, el cual puede tener cualquier radio. Cuánticamente, como la energía está cuantizada, puede demostrarse que los electrones toman un área del orden  $2\pi^2/eB_0$ . Contrapuesto a esto, los electrones deben permanecer alejados unos de otros por ser fermiones, ya que no pueden ocupar el mismo estado cuántico. Así, cada electrón no sólo necesita espacio, sino que cada uno necesita *su propio espacio*.

Una vez descubierto el efecto por Von Klitzing, subyacía la predicción teórica de la naturaleza aislante del sistema. Además se necesitaba obtener el número de cuantos  $C_r$  en función de las variables externas del sistema, es decir, el diagrama de las fases cuánticas. Finalmente los teóricos lograron darse cuenta de lo esencial de considerar la superficie del sistema. Es decir, el sistema es aislante si no tiene superficie pero se vuelve conductor al cor-

tarlo. Los responsables de la conducción son modos superficiales. Eventualmente se demostró que el número de modos superficiales está cuantizado, sirviendo como una especie de carriles para los electrones.

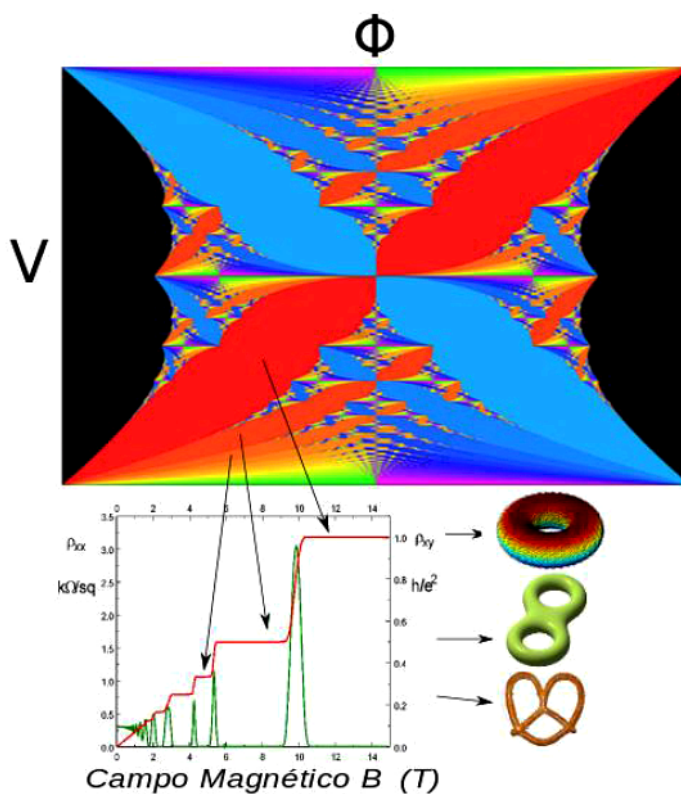
Tal vez lo más sorprendente fue el hecho de que cuando Thouless, junto con M. Khomoto, Nightingale y den Nijs finalmente lograron obtener el diagrama de fases cuánticas, la fórmula para encontrar al entero  $C_r$  tenía exactamente la forma de otra proveniente de la topología. Esta fórmula permite calcular el número de agujeros de una superficie. Debe decirse que la topología es la rama de las matemáticas que estudia las propiedades de superficies e hipersuperficies cuando se deforman sin cortar y pegar. La idea es analizar qué propiedades permanecen fijas y cuáles varían al producir deformaciones. De este modo, una dona y una taza son equivalentes por poseer un agujero, mientras que una esfera y un plato no poseen agujeros. Por ello una dona puede deformarse en una taza pero no en una esfera. Es notable también que los cambios sólo pueden ocurrir con saltos dado que no existen “fracciones de agujero”.



**Figura 22.5:** Mariposa de Hofstadter. En el eje de las abscisas aparece la razón entre flujo magnético de la red y el flujo cuántico elemental, mientras que en las ordenadas está la energía de los electrones. Puede pensarse que ésta es la relación entre voltaje aplicado ( $V$ ) contra el campo magnético. Los estados permitidos aparecen marcados en negro. Las regiones en blanco, con forma de alas de mariposa, son regiones prohibidas para los electrones.

En vista de esto, resultó claro que cada fase cuántica estaba caracterizada por un invariante topológico. A  $C_r$  se le conoce como el número de Chern. En la figura 22.6 podemos ver la representación de las fase cuánticas y la conductancia asociada a cada una de ellas, así como el número de

agujeros asociados a cada fase. Si comparamos con la figura 22.5, es revelador darse cuenta que el diagrama ocupa las zonas en blanco de la mariposa de Hofstadter. La razón es que la mariposa se calcula para sistemas infinitos que son aislantes, mientras que la conducción aparece para el sistema finito. Los estados de superficie aparecen siempre en las zonas prohibidas del sistema infinito. Topológicamente el sistema infinito o con condiciones periódicas es distinto al finito justamente por tener un corte.



**Figura 22.6:** Diagrama de fases del efecto Hall cuántico en función del voltaje aplicado contra la razón de flujos magnéticos. Cada zona de diferente color representa una fase con la misma conductancia de Hall, indicada en la gráfica de conductancia en función del campo magnético aplicado. A cada fase le corresponde un invariante topológico. Aquí se muestran tres ejemplos; con 1 agujero (dona), 2 agujeros (lente) y tres agujeros. Nótese que las fases cuánticas corresponden a las zonas en blanco de la mariposa de Hofstadter. La razón es que la conducción se debe a estados de superficie, los que se producen en energías no permitidas del sistema infinito.



Desde que Von Klitzing midió la conductancia de los niveles de Landau, se han investigado diagramas en otros sistemas. Así, una vez entendido el efecto Hall cuántico se encontró que los electrones pueden interactuar entre sí, de modo que  $C_r$  pueda tener valores fraccionarios (llamado efecto Hall fraccionario). También se planteó la posibilidad de tener un efecto Hall sin campo en 1987, lo cual se logró mediante la construcción de un material diseñado ex profeso en el año 2007. A este efecto se le llama de Hall anómalo y marcó el despegue del campo de los aislantes topológicos como uno de los temas mas relevantes de la física contemporánea. Actualmente se trabaja en modos de superficie con polarización de espín para usarlos en el campo de la espintrónica ([Capítulo 11](#)) y la computación cuántica. Como cereza del pastel, en el año de 2014 finalmente se pudo medir la mariposa de Hofstadter usando para ello grafeno sobre otro cristal bidimensional, nitruro de boro (h-BN). El nitruro de boro induce un patrón de deformaciones en el grafeno generando una super-red con un parámetro  $a$  enorme, lo cual baja la intensidad del campo magnético requerido.

Para concluir diremos que las ideas esbozadas en este capítulo pueden extenderse a muchas áreas de la ciencia. Las fases de los modelos de espín se pueden utilizar para entender votaciones, alianzas, guerras e inclusive el comportamiento del cerebro o la evolución de las especies. También en cosmología y altas energías juegan un papel importante. En su evolución el universo ha presentado sucesivas transiciones que han roto simetrías, como la del campo electrodébil hacia el campo electromagnético que observamos hoy en día. La ubicuidad del tema lo hace indispensable en la formación de todo físico; tanto así como el sabio consejo de Sor Juana tomado de Lupericio Leonardo *“bien se puede filosofar y aderezar la cena”*.

PARA SABER MÁS:

- Kerson Huang, *Statistical Mechanics*, 2a. Edición. Ed. John Wiley & Sons., New York, 1987.
- J.P. Sethna, *Entropy, Order Parameters and Complexity*, Oxford Master Series in Statistical, Computational and Theoretical Physics, Ed. Oxford University Press, Oxford, 2006.
- Phillip Phillips, *Advanced Solid State Physics*, 2nd. Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2012.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

**ESTADOS METAESTABLES***Alejandro Vásquez Arzola\**

En la naturaleza existen diversos fenómenos que conllevan cambios que pueden ser estructurales, de composición, de forma o incluso de función, que siguen una ruta al equilibrio, pasando por estados críticos que persisten por lapsos de tiempo relativamente largos y luego son abandonados de manera súbita e impredecible. A estos estados se les conoce como estados metaestables. Dos ejemplos que resultan familiares son los cambios de fase que sufre el agua al pasar de vapor a líquido, por ejemplo en su condensación cuando llueve, o de líquido a sólido cuando se congela. También podríamos añadir las transformaciones estructurales y funcionales que implica la metástasis en la progresión del cáncer, o los eventos abruptos en la ocurrencia de terremotos. Aunque estos procesos pueden observarse en escalas temporales y espaciales muy diferentes, uno de los retos de la teoría de los estados metaestables es poder entenderlos desde los fenómenos que ocurren a escala mesoscópica, de tal manera que nos permita trazar su origen en procesos físico-químicos comunes. En esta monografía se revisa un modelo dinámico muy simple que da cuenta de la naturaleza de estos procesos de cambio. A partir de este modelo, al final del capítulo se presenta un modelo experimental basado en una técnica imprescindible hoy en día en el estudio de los sistemas microscópicos, que son las técnicas de micromanipulación óptica.

Sabemos que la temperatura de fusión del hielo es muy cercana a  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ <sup>1</sup> y si buscáramos en un libro de termodinámica el diagrama de fases del agua, podríamos ver que la congelación sucede exactamente a la misma temperatura. Esto nos hace pensar que si bajamos la temperatura del agua lentamente, digamos de la temperatura ambiente hasta un valor menor a cero,

---

\*Departamento de Física Cuántica y Fotónica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

<sup>1</sup>Esto, a una presión de 1 atm.

en el momento que alcance  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ , la muestra se congelará instantáneamente. Realiza el siguiente experimento. Toma una botella de plástico con agua purificada e introdúcela en tu congelador. Al cabo de un par de horas habrá alcanzado la temperatura de tu congelador, que puede estar entre  $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $-2\text{ }^{\circ}\text{C}$ , y sin que necesariamente corras con mucha suerte, al cabo de este tiempo, podrás ver que el agua estará aún líquida. Tómala y vacíala en un recipiente o simplemente agítala un poco, sorprendentemente observarás cómo se convierte instantáneamente en hielo. La termodinámica de equilibrio predice que el agua se encuentra en un estado crítico a  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ , es decir en un estado donde la fase sólida y líquida coexisten, y que a una temperatura un poco menor la energía de Gibbs toma un valor mínimo<sup>2</sup> que corresponde a un estado sólido puro, mientras que a temperaturas un poco mayores, su estado corresponde a una fase líquida. Sin embargo, este cambio de fase no ocurre de manera instantánea ni de igual manera si se funde el hielo que si se congela el líquido. A grandes rasgos, al agitar la botella del líquido a una temperatura menor a  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$  estás promoviendo que el sistema abandone un estado de equilibrio metaestable<sup>3</sup> y pase a su estado estable. Aunque este proceso lo podemos describir a partir de variables macroscópicas, como temperatura o energía, una explicación más enriquecedora resulta cuando hacemos uso de conceptos o fenómenos que ocurren a escala mesoscópica, como es la difusión y la energía de interacción entre las moléculas del agua<sup>4</sup>. De manera similar, la condensación del agua en la atmósfera, que

---

<sup>2</sup>Consecuente con las restricciones de presión y temperatura impuestas.

<sup>3</sup>Entendemos un estado metaestable como el estado de equilibrio que ocupa un sistema que no corresponde al estado con un mínimo de energía global, acorde a las constricciones impuestas, como temperatura y presión, y en el cual puede subsistir lapsos de tiempo relativamente largos antes de alcanzar el estado de mínima energía global.

<sup>4</sup>En realidad estos cambios pueden ser bastante complejos. En el proceso de enfriamiento las moléculas de agua se difunden y cuando colisionan pueden formar pequeñas estructuras cristalinas llamadas núcleos o semillas que pueden favorecer la agregación de más moléculas, pudiendo llegar a formar estructuras sólidas macroscópicas. Debido a la tensión superficial existente entre el núcleo y su entorno, si estos son muy pequeños son inestables, es decir que fácilmente se disocian o funden. Para que el proceso de congelamiento se lleve a cabo tiene que suceder que se formen núcleos estables que permitan el crecimiento de la estructura sólida macroscópica. Qué tan rápido ocurre este proceso, va a depender de la tasa de formación de núcleos, que a su vez depende de las variables macroscópicas del sistema, como la temperatura y la presión. Así, se sabe que en el agua a una temperatura poco menor a  $0\text{ }^{\circ}\text{C}$  prácticamente no se forman núcleos estables que den lugar a un congelamiento, por lo que es muy poco probable que el sistema alcance su mínimo de energía por sí solo, por lo que el sistema permanecerá muy probablemente en un estado metaestable por un tiempo muy largo. Las impurezas en el agua, ciertas imperfecciones o rugosidades en el recipiente o perturbaciones externas en el sistema pueden favorecer la formación de núcleos estables que permitan el congelamiento más rápido del agua.

se manifiesta como lluvia, conlleva un proceso de transición de fase de un estado metaestable a uno estable. Probablemente hayas observado alguna vez cómo un relámpago desencadena súbitamente el inicio de un aguacero. Estos fenómenos comparten tres propiedades generales que son típicas en los sistemas que presentan estados metaestables:

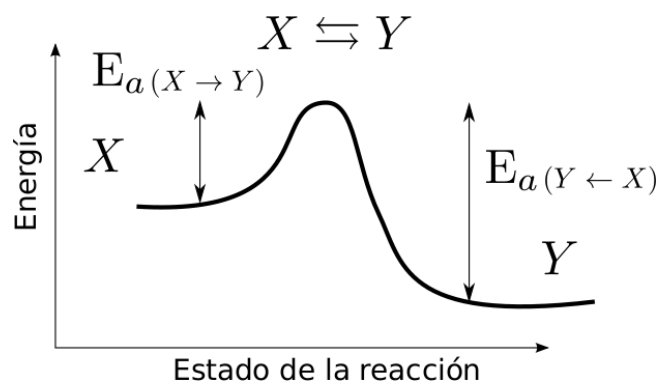
- Los estados metaestables subsisten por tiempos muy largos.
- Las transformaciones se llevan a cabo muy rápidamente en comparación con los tiempos de vida de los estados metaestables. Se podría decir que suceden repentinamente.
- El momento preciso en el que ocurren las transformaciones es impredecible, es decir estas ocurren de manera estocástica.

Una reacción química es otro ejemplo de un sistema que presenta metaestabilidad. Estas suceden espontáneamente a una tasa media conocida como tasa de reacción. La ecuación de Arrhenius es una relación empírica de la tasa de reacción  $f_k$  y su dependencia con la energía térmica del sistema  $k_B T$ , con  $k_B$  la constante de Boltzmann, y la energía de activación  $E_a$ :

$$f_k = A e^{-\frac{E_a}{k_B T}}. \quad (23.1)$$

$A$  es una constante con unidades de  $s^{-1}$ , que está relacionada con la tasa media de colisiones entre dos átomos o moléculas y por lo tanto con la concentración o densidad de la sustancia. Así, el factor exponencial en la ecuación (23.1) podemos interpretarlo como la fracción de todas las colisiones que conllevan una transformación.  $E_a$  es la energía que tiene que alcanzar un átomo o una molécula para que se lleve a cabo la reacción. Esto puede verse de manera esquemática en la figura 23.1.

Para que el estado de la reacción  $X$  pase a  $Y$  es necesario suministrarle una energía  $E_{a(X \rightarrow Y)}$  al sistema, que generalmente proviene de fluctuaciones térmicas. A estos procesos se les conoce como reacciones o procesos inducidos por fluctuaciones térmicas. Esta energía también puede ser el resultado de efectos cuánticos o de perturbaciones externas en un sistema abierto. En la naturaleza existen diversos fenómenos que presentan tasas de cambio con un factor exponencial similar al de la ecuación (23.1), en cuyo caso podemos decir que siguen una tasa de cambio tipo de Arrhenius. Así, podemos mencionar el caso de los isómeros, que son formas de una misma molécula que subsisten por tiempos muy largos antes de adquirir la forma final más estable. La dinámica de las vacancias en una estructura cristalina



**Figura 23.1:** Modelo del potencial que da cuenta de la tasa de reacción o de cambio en una transición de estados metaestables. En este caso el estado del sistema conlleva una transformación que va del estado  $X$  al estado  $Y$ , o viceversa, el cual pasa por un punto crítico inestable.  $E_a$  es la energía de activación que depende de la dirección en la que se da el cambio. El estado de la reacción puede estar definido por el porcentaje de masa, o molaridad, del producto de la reacción.

y la formación de fracturas por acumulación de esfuerzos, este último íntimamente ligado a los terremotos, son otros fenómenos que comparten una tasa de cambio tipo de Arrhenius. De igual manera, la magnetización de un material ferromagnético conlleva una transición a un estado metaestable; cuando uno elimina el campo magnético que indujo la magnetización es fácil darse cuenta que ésta no desaparece instantáneamente, sino que es necesario esperar un lapso de tiempo impredecible.

En este punto podemos advertir que un modelo dinámico se hace necesario para poder describir estos fenómenos. Un modelo muy simplificado basado en la teoría de procesos estocásticos fue propuesto por Kramers, entre otros investigadores, en la década de los treinta del siglo pasado. Haciendo una analogía con la ecuación de movimiento de una partícula browniana, propuesta por Langevin algunos años atrás, en este modelo el sistema está descrito por una variable  $x$  que se encuentra en equilibrio térmico con un baño a una temperatura  $T$  y a su vez está afectado por un potencial  $U(x)$  y por una fuerza estocástica  $\xi(t)$ . Así, de acuerdo a la segunda ley de Newton, el estado del sistema se puede describir por:

$$m\ddot{x} + \gamma\dot{x} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} + \xi(t). \quad (23.2)$$

La masa efectiva del sistema está dada por  $m$ . Cabe mencionar que en el caso de una partícula browniana,  $x$  representa la posición de la partícula.

El segundo término del lado izquierdo de la ecuación (23.2) es una fuerza disipativa que es proporcional a la velocidad, con un factor de proporcionalidad constante  $\gamma$  (coeficiente de arrastre). La fuerza  $\xi(t)$  es una fuerza que varía de manera impredecible con el tiempo, es decir es una función estocástica, que resulta de las interacciones del sistema con su entorno que se supone está constituido por un número de elementos muy grande. En el caso de una partícula browniana,  $\xi(t)$  surge por las múltiples colisiones de las moléculas que rodean a la partícula. Una suposición típica es que  $\xi(t)$  no presenta memoria, es decir que está representada por una función temporal de ruido no correlacionado, y que además sigue una distribución de probabilidad gaussiana, con una función de autocorrelación  $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2k_B T \gamma \delta(t - t')$ . Una aproximación común es suponer que la parte disipativa domina en relación con la parte inercial, de manera que el primer término de la ecuación (23.2) puede ser ignorado<sup>5</sup>. Desde este punto de vista, la partícula descrita por  $x$  mostrará un movimiento aleatorio permanente, que le permitirá explorar una región muy amplia del potencial de energía al que está sujeta e incluso superar barreras de potencial que pudieran estar constriñendo su movimiento. Utilizando este modelo, Kramers fue capaz de derivar una ecuación para calcular la tasa media de salto para una partícula browniana que pueda rebasar una barrera de potencial de altura finita  $U_0$  desde un punto de equilibrio estable, dada por:

$$f_k = \frac{1}{\bar{\tau}_k} = \tau_0^{-1} \exp\left(-\frac{U_0}{k_B T}\right), \quad (23.3)$$

con

$$\tau_0^{-1} = \frac{\sqrt{-U''(x_{min})U''(x_{max})}}{2\pi\gamma}, \quad (23.4)$$

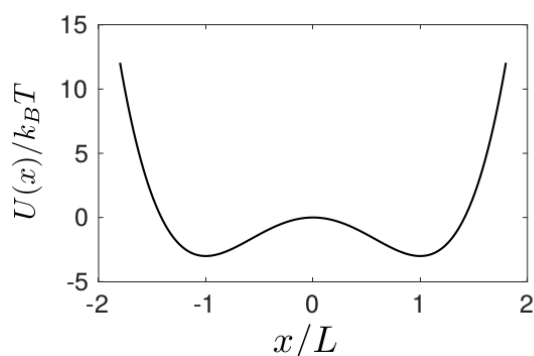
donde  $x_{min}$  es la posición del punto de equilibrio estable (mínimo de potencial) y  $x_{max}$  la posición del punto de equilibrio inestable (máximo del potencial), mientras que  $U''$  representa la curvatura del potencial en estos puntos críticos. Es importante mencionar que Kramers utilizó una serie de aproximaciones o suposiciones para poder derivar la ecuación (23.2), como suponer que los saltos de la barrera sólo ocurren en una dirección, es decir que una vez que el proceso se activa ya no puede volver al estado inicial. Otra consideración importante es que los eventos de salto son raros, para lo que Kramers supuso que la barrera tiene que ser más grande en comparación con la energía térmica ( $U_0 \gg k_B T$ ). Un potencial paradigmático

<sup>5</sup>A esta aproximación se le conoce como límite de fricción grande o sobreamortiguado.

en el estudio de estos sistemas es el potencial biestable representado por la ecuación (ver figura 23.2):

$$U(x) = 4U_0 \left[ \frac{1}{4} \left( \frac{x}{L} \right)^4 - \frac{1}{2} \left( \frac{x}{L} \right)^2 \right], \quad (23.5)$$

donde  $L$  es la distancia entre el máximo y uno de los mínimos del potencial. Así la ecuación de Kramers (ecuación (23.3)) representa uno de los primeros esfuerzos para derivar la ecuación de Arrhenius a partir de primeros principios, y a su vez ha sido considerada como un punto de partida para describir a los estados metaestables.



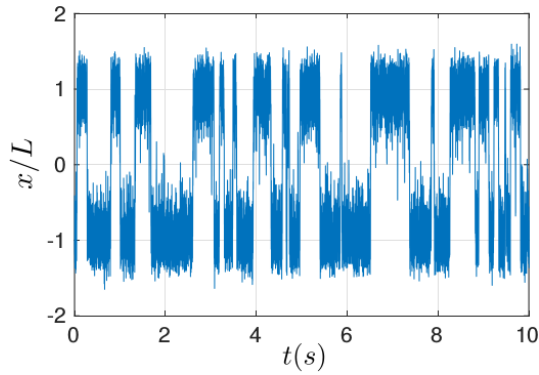
**Figura 23.2:** Bosquejo del potencial cuártico descrito por la ecuación (23.5). En este caso la profundidad del pozo es  $U_0/k_B T = 3$ . La posición de los mínimos del potencial están en  $x/L = \pm 1$ .

Para ilustrar con más detalle la fenomenología de una partícula browniana descrita por la ecuación (23.2), presentaremos una serie de resultados numéricos (ver sección “Para saber más” al final del capítulo para ver más detalles del método utilizado). La figura 23.3 muestra un ejemplo de la trayectoria que sigue una partícula en el potencial cuártico descrito en la figura 23.2. Podemos ver cómo la partícula se mantiene la mayor parte del tiempo alrededor de alguno de los dos estados estables ( $x/L = \pm 1$ ), pero de vez en vez logra rebasar la barrera ( $x/L = 0$ ) y pasar al otro lado. Las partículas utilizadas para la simulación tienen un radio  $r_p = 0.5 \mu\text{m}$  y se encuentran a temperatura ambiente. En este caso la barrera de potencial mide  $U_0 = 3k_B T$ . La figura 23.4 muestra el comportamiento exponencial de la distribución de los tiempos de escape<sup>6</sup>. En este caso particular el tiem-

<sup>6</sup>Para representar estos resultados como densidades de probabilidad bastaría con normalizar el histograma con su área.



po medio de escape es  $\bar{\tau}_k = 0.194$  s. Al aumentar la altura de la barrera se espera que el tiempo medio de escape aumente de acuerdo a la ecuación (23.3), siguiendo una relación exponencial con la energía, siempre y cuando las curvaturas en los puntos críticos se mantengan constantes. Como las curvaturas de los puntos críticos del potencial cuártico dependen también de la energía, es más fácil analizar el cociente  $\bar{\tau}_k/\tau_0$  de la relación (23.3) para hacer evidente el comportamiento exponencial. Haciendo el experimento anterior para diferentes valores de  $U_0$  podemos estimar  $\bar{\tau}_k/\tau_0$  como función de la altura de la barrera. Esto podemos verlo representado en la figura 23.5 en una escala semilogarítmica en el eje Y. Conforme el valor de

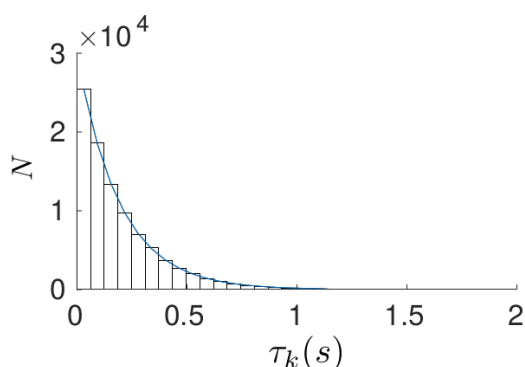


**Figura 23.3:** Primeros 34 saltos de una partícula browniana en un potencial cuártico (figura 23.2). La simulación se realizó utilizando el proceso de Wiener de la ecuación (23.2) con los valores  $U_0 = 3 k_B T$ ,  $r_p = 0.5 \mu\text{m}$  y  $L = 0.1 \mu\text{m}$ , con  $T = 293.15$  K (20 °C).

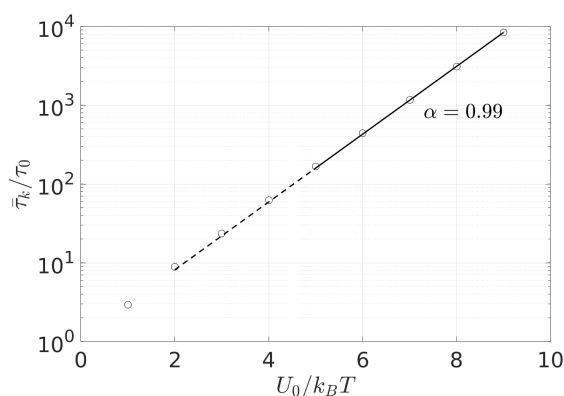
$U_0$  crece en relación con la energía  $k_B T$ , el comportamiento se asemeja más a la ecuación de Kramers o de Arrhenius como lo indica la pendiente  $\alpha \rightarrow 1$  (ecuaciones (23.1) y (23.3)).

Quizás las demostraciones más nítidas de esta fenomenología se realizaron en los años noventa a partir de técnicas experimentales de manipulación con pinzas ópticas<sup>7</sup>. Una pinza óptica consiste en un haz de luz láser muy concentrado que es capaz de confinar partículas dieléctricas microscópicas en tres dimensiones. A grandes rasgos, dicho mecanismo se entiende a partir del momento dipolar inducido en un objeto dieléctrico por el campo

<sup>7</sup>Revisar los artículos: *Escape and Synchronization of Brownian Particles* (1992) y *Thermally activated transitions in a bistable three-dimensional optical trap* (1999).



**Figura 23.4:** Histograma de los tiempos de salto para una partícula browniana en el potencial cuártico. Los parámetros utilizados para la simulación son los mismos que los mostrados en la figura 23.3. Durante un lapso de 5 h se contabilizaron 92000 saltos, a partir de los cuales se obtuvo este histograma. El tiempo promedio de salto es  $\bar{\tau}_k = 0.194$  s. La línea continua muestra la dependencia exponencial ( $\sim \exp\{-\tau_k/\bar{\tau}_k\}$ ) de la probabilidad del tiempo de salto.



**Figura 23.5:** Dependencia del tiempo promedio de salto con la barrera del potencial  $U_0/k_B T$ . Para observar más fácilmente su comportamiento se eligió una escala logarítmica en el eje  $y$ . Así se puede observar que el comportamiento es casi lineal, lo que significa que la dependencia es casi exponencial, con la pendiente  $\alpha \approx 1$ , no obstante el comportamiento exponencial se hace más evidente conforme la altura de la barrera crece ( $\alpha \rightarrow 1$ ), que es congruente con la ecuación de Kramers (ecuación (23.3)).

electromagnético incidente<sup>8</sup>. Así, cuando un haz con un perfil gaussiano es

<sup>8</sup>La fuerza resultante se puede descomponer en dos, una no conservativa que actúa en la dirección de la propagación del haz de luz, y una conservativa, que actúa de acuerdo a las inhomogeneidades del campo óptico. Un objeto con un índice de refracción mayor al del medio circundante presenta una polarizabilidad positiva y será atraído hacia las zonas más brillantes.

fuertemente enfocado se genera una fuerza muy grande hacia la zona más brillante que es capaz de confinar a los objetos dieléctricos en tres dimensiones. La fuerza óptica resultante se puede describir de manera muy precisa como un potencial armónico tridimensional. Cuando dos de estas pinzas son colocadas muy cerca una de la otra es posible reproducir un potencial de energía efectivo similar al potencial biestable descrito anteriormente. Con un sistema así es posible confinar una partícula browniana, digamos de  $1\mu\text{m}$  de tamaño, de manera estéril y no invasiva, y así observar de manera muy precisa y nítida los procesos de escape en un sistema browniano real. Utilizando este tipo de analogías experimentales también ha sido posible modelar otros procesos que ocurren en sistemas dinámicos donde la parte estocástica juega un rol importante, como la sincronización de osciladores estocásticos, procesos de transporte en potenciales asimétricos (dinámica *ratchet*), así como procesos de difusión subdifusivos o superdifusivos.

A manera de conclusión, el fenómeno de metaestabilidad podemos encontrarlo en una gran diversidad de procesos fuera del equilibrio que ocurren en la naturaleza. Dicha universalidad se basa en que su ruta al equilibrio pasa por estados críticos que sobreviven por lapsos de tiempo relativamente largos y son abandonados de manera súbita e impredecible. Esto permite tender puentes para relacionar y estudiar fenómenos aparentemente disímiles. Aquí hemos revisado un modelo simplificado que reproduce dicha fenomenología, en donde el proceso de relajación hacia a un estado estable global es promovido por las fluctuaciones térmicas del sistema. Esperemos que esta revisión nos permita generar hipótesis o propuestas para aproximarnos al estudio de otros sistemas que exhiben metaestabilidad.

#### PARA SABER MÁS:

- Ver el programa *simulacionDoblepozo.m* en el [material suplementario](#). Es un ejemplo de la simulación de la trayectoria de una partícula browniana en un potencial de doble pozo. El programa está escrito en el lenguaje de programación *Matlab*.
- Kondepudi, D. y Prigogine, I., ***Modern thermodynamics: from heat engines to dissipative structures***, John Wiley & Sons, 2014.
- Stepanov, Sergey S., Secciones 7.1 y 9.4 en ***Stochastic World***, Mathematical Engineering, Springer, New York, 2013.
- Solé, R. V., ***Phase transitions***, Princeton University Press, 2011.

- Bovier, A. y den Hollander, F., ***Metastability: A Potential-Theoretic Approach***, Vol. 251, pp. 16-17, Springer International Publishing, Switzerland, 2015.
- Hänggi, P. y Talkner, P., ***Reaction-rate theory: fifty years after Kramers***, *Reviews of Modern Physics*, 62, 251 (1990).

## CUANDO LA ESTADÍSTICA DOMINA A LA FÍSICA

*Pier A. Mello\**

En la Naturaleza hay muchos sistemas físicos cuya descripción involucra conceptos ondulatorios. En esta presentación vamos a discutir una serie de fenómenos complejos que surgen de la interferencia entre las ondas, y la consecuente necesidad de un enfoque estadístico para encontrar su interpretación física. La complejidad de los fenómenos que vamos a considerar aquí puede deberse a la naturaleza caótica de la dinámica clásica asociada al sistema, como en el caso de ciertas cavidades de microondas y cavidades cuánticas, o a la aleatoriedad de los potenciales dispersores, como en el caso de los conductores eléctricos desordenados. El tema recurrente en este trabajo es la universalidad del comportamiento estadístico, en el sentido de que este enfoque involucra un número relativamente pequeño de parámetros físicamente relevantes, mientras que los detalles restantes sirven como un mero "andamio". Ilustraremos esta filosofía mostrando que los sistemas físicos mencionados más arriba se pueden estudiar mediante un enfoque unificado.

Los fenómenos físicos asociados con la dispersión *compleja* de las ondas ha capturado el interés de los físicos desde hace mucho tiempo. Por ejemplo, la dispersión múltiple coherente de las ondas ha sido de gran importancia en óptica. El interés por este problema revivió en las últimas décadas, tanto para las ondas electromagnéticas como para los electrones, en relación con el fenómeno de localización, que da lugar a muchos efectos fascinantes.

En esta presentación nos van a interesar sistemas esencialmente de un cuerpo, asociados con electrones no interactuantes moviéndose en un medio desordenado de dispersores distribuidos al azar, como las impurezas en un metal. Nos van a interesar también cavidades de ondas, para las cuales

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

la dinámica de una partícula clásica sería caótica, así como sistemas complicados de muchos cuerpos, como los ejemplos excelentes que ofrece la física nuclear.

El análisis de los resultados es, a menudo, estadístico, ya que los detalles son extraordinariamente complejos y físicamente carentes de interés. En efecto, pueden emerger de un tratamiento estadístico nuevas características *universales*, que permanecerían ocultas en un estudio de los detalles.

La dispersión estadística de ondas va a ser el tema central de esta aportación. Los aspectos conceptuales de este tema se discuten en forma pedagógica en la referencia [1], a la cual referimos al lector interesado. En el presente trabajo, con el objeto de hacer el tema más comprensible y para ponerlo en un contexto más general, haremos, en la próxima sección, una presentación elemental de la “complejidad” de los sistemas caóticos en la física clásica, contrastada con la “simplicidad” de los sistemas integrables. Presentaremos después las ideas generales detrás de los problemas de dispersión que requieren un tratamiento estadístico, junto con una serie de aplicaciones teóricas y prácticas. Con esa perspectiva, haremos después una presentación de los sistemas ondulatorios con características universales arriba mencionados: el núcleo atómico, las cavidades cuánticas y de microondas y las guías de onda desordenadas. Es realmente atractivo que estos sistemas, cuyas dimensiones abarcan muchos órdenes de magnitud, se puedan describir estadísticamente de una manera unificada. Finalmente, la última sección resume la filosofía detrás de este trabajo.

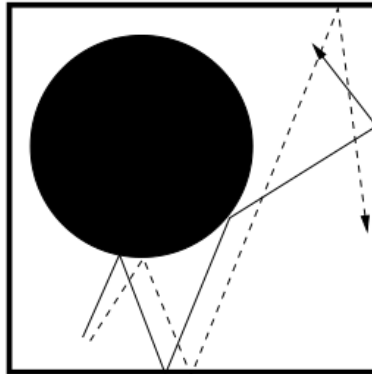
#### SISTEMAS “SENCILLOS” Y “COMPLEJOS” EN LA FÍSICA CLÁSICA

El oscilador armónico unidimensional es uno de los sistemas físicos más simples que se estudian en un curso de mecánica clásica: se trata de la dinámica de una masa  $m$  atada a un resorte que obedece la ley de Hooke. Las ecuaciones de movimiento son integrables, de modo que conociendo las condiciones iniciales, o sea la posición de la partícula y su velocidad al tiempo inicial, se pueden calcular analíticamente la posición y la velocidad en cualquier otro instante.

Un cambio en las condiciones iniciales da lugar a una nueva trayectoria, para la cual existe una fórmula matemática sencilla. Si el cambio es pequeño, la nueva trayectoria difiere poco de la original. Decimos que tenemos un sistema “simple”, o, con más precisión, integrable.

Muy distinto es el comportamiento dinámico del sistema que se ilustra esquemáticamente en la figura 24.1: una partícula (imaginemos una cani-

ca) se mueve en el interior de una caja cuadrada, donde se encuentra un obstáculo fijo circular. Arrojemos la canica desde un cierto punto, con una cierta velocidad. Si modificamos estas condiciones iniciales, no importa qué tan pequeño sea el cambio, después de un tiempo suficientemente grande la trayectoria habrá cambiado completamente: pequeñas causas dan lugar a grandes efectos. En la figura 24.1 se muestran dos trayectorias con esas características. La trayectoria es, por supuesto, determinista; pero a largo plazo se vuelve impredecible. Este sistema, con comportamiento dinámico “complejo”, no integrable, es un ejemplo de sistemas caóticos. El matemático soviético Sinai lo estudió en detalle en los años 60 y se conoce como el “billar de Sinai”. En el [Capítulo 25](#) sobre caos clásico de esta colección de contribuciones, Rafael Pérez trata en detalle el tema que acabamos de esbozar.



**Figura 24.1:** El billar de Sinai descrito en el texto.

¿Debemos entonces concluir que la descripción detallada de la dinámica de un sistema caótico no tiene esperanza de éxito? En efecto, no sólo no tiene esperanza de éxito, sino que es carente de interés, ya que hay que hacer la pregunta adecuada.

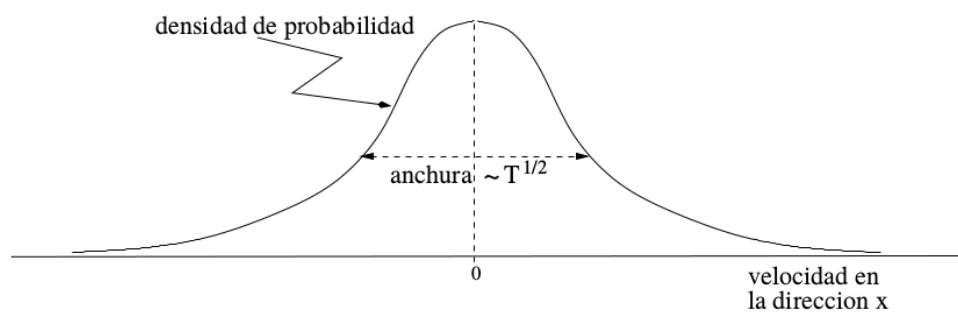
Para encontrar la clave acerca de la pregunta adecuada, repitamos el experimento muchas veces, digamos mil veces, con diferentes condiciones iniciales y preguntemos: ¿qué fracción de las canicas se encuentra, en un cierto instante, en una región dada del billar? Cuando el número de tiradas aumenta indefinidamente, se encuentra que, para áreas iguales del billar, esa fracción tiende al mismo valor numérico. Si repetimos el experimento con otra muestra de muchas tiradas, encontramos el mismo resultado: decimos que hemos descubierto una *regularidad estadística*. Se puede demos-

trar que esa fracción coincide con la fracción de tiempo transcurrido por *una* partícula en esa región. Esta propiedad tan importante se conoce con el nombre de “ergodicidad”. La lección que aprendemos es que, analizando los resultados en forma estadística, llegamos a una respuesta sencilla. La fracción de partículas que acabamos de describir se llama la *probabilidad* de encontrar la partícula en una cierta área del billar: esta cantidad sí es predecible.

Un sistema extraordinariamente complejo es el de las moléculas de un gas clásico encerrado en una caja. Las trayectorias de las moléculas son muy complicadas y no son predecibles a largo plazo. Su estudio detallado no tiene interés físico alguno, ya que no aprenderíamos mucho de él. Entonces, nuevamente, ¡vamos a formular una pregunta razonable! Preguntemos, por ejemplo, qué fracción de moléculas tendrá su velocidad dentro de un cierto intervalo de valores. La ley de Maxwell-Boltzmann nos da la respuesta: la densidad de probabilidad conjunta de las tres componentes de la velocidad,  $v_x, v_y, v_z$ , está dada por la expresión

$$p(v_x, v_y, v_z) = \frac{e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2kT}}}{(2\pi kT/m)^{3/2}}. \quad (24.1)$$

La respuesta, para este sistema complejo, es muy simple: cada componente de la velocidad tiene una distribución estadística Gaussiana, con centroide igual a cero y anchura proporcional a  $\sqrt{T}$ , donde  $T$  es la temperatura del sistema, como se ilustra en la figura 24.2. Sistemas con diferentes detalles microscópicos, pero con la misma temperatura, nos dan la misma respuesta: ¡esta respuesta tiene entonces un carácter universal!



**Figura 24.2:** La densidad de probabilidad Gaussiana de una componente de la velocidad de las moléculas de un gas clásico. Su anchura es proporcional a  $\sqrt{T}$ .

La lección que hemos aprendido es que, en este ejemplo, *un enfoque es-*



*tadístico pone de manifiesto un concepto que, en una descripción detallada, permanecería oculto: el concepto de temperatura.*

#### DISPERSIÓN ESTADÍSTICA DE ONDAS

Estando en un cuarto oscuro, ¿qué hacemos si queremos ver un objeto? Encendemos un foco, para que la luz emitida, que es una onda electromagnética, incida sobre el objeto, de modo que la onda dispersada llegue a nuestros ojos y, así, veamos el objeto.

Esta observación elemental es la base del procedimiento que se sigue en el laboratorio para explorar, por ejemplo, el átomo o el núcleo atómico. Si hacemos incidir rayos X sobre un átomo, la manera cómo se difractan nos permite obtener información sobre el átomo. Análogamente, los físicos experimentales bombardean el núcleo atómico, por ejemplo mediante neutrones, descritos matemáticamente por una onda que satisface la ecuación de Schrödinger, para obtener información sobre dicho núcleo.

Cuando una onda incide sobre un sistema, interactúa con los centros dispersores y se produce una onda dispersada, que se suma a la onda incidente para producir la onda total resultante. Esto ocurre, por ejemplo, con una onda en un estanque de agua que contiene un obstáculo, que actúa como centro dispersor. Si hay muchos centros dispersores distribuidos al azar, la onda resultante puede ser muy compleja. Este es un ejemplo de dispersión de ondas por un medio desordenado, que va a requerir un tratamiento estadístico para su estudio.

En la Naturaleza hay muchos tipos de ondas:

- 1) Las ondas electromagnéticas, que son la base del funcionamiento de un aparato de radio, de la televisión y del radar.
- 2) Las ondas elásticas, como las ondas sonoras, las ondas en un fluido y las ondas sísmicas.
- 3) En la descripción mecánico-cuántica de la Naturaleza, las partículas microscópicas como los electrones, los protones, etc., se describen mediante una función de onda que satisface la ecuación de Schrödinger. Una función de onda puede ser reflejada y transmitida por un obstáculo, y puede exhibir fenómenos de interferencia como las “ondas ordinarias”.
- 4) Una corriente eléctrica consiste de electrones que fluyen en el interior de un conductor: en su descripción mecánico-cuántica, la función de

onda sufre dispersión por los iones situados en el interior del conductor.

En todos estos ejemplos, ciertos aspectos pueden ser diferentes, pero los principios físicos principales, como los fenómenos de interferencia, reflexión y transmisión, son los mismos.

Los fenómenos ondulatorios en medios desordenados tienen un interés teórico muy grande, además de una serie de aplicaciones prácticas muy variadas.

Los fenómenos asociados con la propagación de ondas en medios con desorden volumétrico han recibido particular atención. Por ejemplo:

- 1) la propagación de ondas electromagnéticas a través de medios desordenados, cuyo entendimiento tiene aplicaciones importantes en el estudio del radar;
- 2) la propagación de ondas sonoras a través de medios desordenados, que ha tenido aplicaciones en la investigación de la estructura del subsuelo y en el descubrimiento de yacimientos petrolíferos;
- 3) la propagación de las ondas sísmicas por el subsuelo.

También se han estudiado los fenómenos ondulatorios en sistemas con desorden superficial:

- 1) dispersión de luz por superficies irregulares;
- 2) propagación de ondas sonoras en el océano, con aplicaciones al estudio del sonar, y efectos de superficie por la complejidad del fondo marino.

Es claro que una descripción detallada de algunos de estos fenómenos muy complejos no sólo no es factible, sino que no tiene mucho interés. El patrón de interferencia que resulta de la dispersión múltiple coherente es tan complejo (un cambio en algún parámetro externo lo altera completamente: recuerde los sistemas mecánicos clásicos caóticos), que sólo un tratamiento estadístico es factible y significativo.

Una característica extraordinaria de los sistemas que hemos descrito es que, a pesar de la complejidad que muestran, a menudo los resultados del análisis estadístico se pueden expresar en términos de *unos pocos parámetros físicamente relevantes*, como la temperatura en el ejemplo anterior. Decimos entonces que estamos frente a un comportamiento de carácter *universal*. Como ya se indicó, los aspectos conceptuales de este tema se discuten en forma pedagógica en la referencia [1], a la cual referimos al lector interesado.

ALGUNOS SISTEMAS ONDULATORIOS QUE MUESTRAN CARACTERÍSTICAS UNIVERSALES

Un problema que se ha estudiado desde hace mucho tiempo es el de los aspectos estadísticos de ciertas reacciones nucleares.

La física nuclear es ciertamente un problema complicado de muchos cuerpos. En el ejemplo que se muestra en la figura 24.3, un protón incide sobre un blanco de  $\text{Cl}^{35}$  y deja un núcleo residual de  $\text{S}^{32}$ , más una partícula  $\alpha$ . El radio del blanco es del orden de 7 fm ( $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$ ). La sección diferencial de este proceso, medida a  $170^\circ$  en el laboratorio y para  $E \sim 10 \text{ MeV}$ , tiene una estructura muy compleja como función de la energía —como se muestra esquemáticamente en la figura 24.4— exhibiendo las así llamadas “fluctuaciones de Ericson”. El proyectil actúa como una “sonda” para investigar las propiedades del sistema.

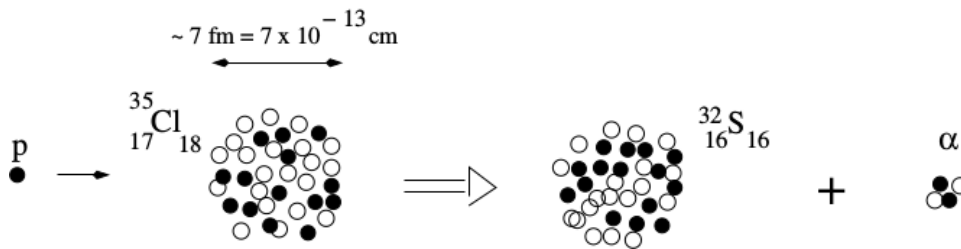


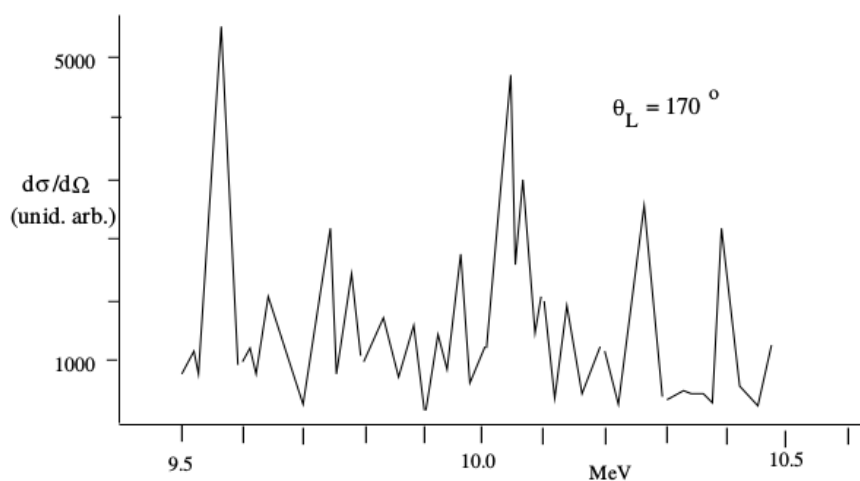
Figura 24.3: Representación esquemática de la reacción nuclear  $\text{Cl}^{35} + p \rightarrow \text{S}^{32} + \alpha$ .

Este es un ejemplo de lo que podríamos llamar *dispersión mecánico-cuántica compleja*; nos recuerda la dispersión de ondas sonoras por un subsuelo muy complejo que mencionamos anteriormente.

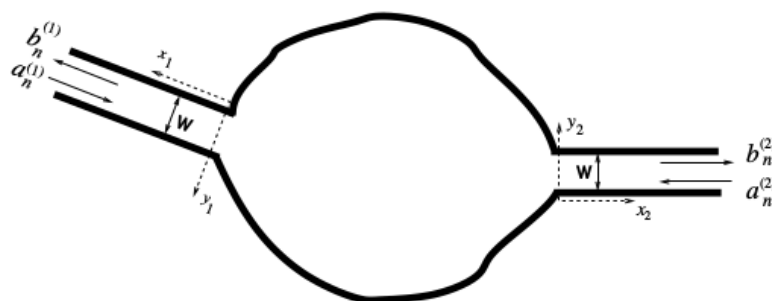
La reacción nuclear anterior es tan compleja que su descripción requiere un tratamiento estadístico: la “teoría estadística de las reacciones nucleares” ha sido un tema de interés para muchos investigadores.

En el ejemplo anterior, el sistema ocurre en la Naturaleza en forma natural. Sin embargo, en el laboratorio también se han construido sistemas cuya descripción cae dentro de una filosofía semejante. Esos sistemas tienen dimensiones  $\sim 1 \mu = 10^{-6} \text{ m}$  y su fabricación requiere técnicas litográficas sofisticadas: se conocen con el nombre de “cavidades cuánticas”, o “puntos cuánticos”. En el ejemplo que se exhibe en la figura 24.5, se hace pasar una corriente eléctrica por la cavidad mediante dos conductores, se mide la diferencia de potencial entre los extremos y se extrae la conductancia  $G$ .

Para temperaturas  $T \sim 100 \text{ mK}$  y dimensiones espaciales  $\leq 1 \mu\text{m}$ , la fase



**Figura 24.4:** Sección diferencial (esquemática) medida a  $170^\circ$  en el laboratorio de la reacción nuclear  $p + \text{Cl}^{35} \rightarrow \text{S}^{32} + \alpha$ . Las mediciones originales se deben a P. von Brentano y colaboradores, y fueron realizadas en 1964.



**Figura 24.5:** Representación esquemática de una cavidad cuántica, cuyas dimensiones son  $\sim 1 \mu$ . Una cavidad electromagnética de interés para nosotros tiene una estructura semejante, con dimensiones  $\sim 1 \text{ m}$ .

de la función de onda de los electrones individuales es coherente a través de todo el sistema físico de interés. Estos sistemas se han llamado *mesoscópicos*.

Supongamos que la cavidad tuviera una forma tal que la dinámica clásica de una partícula moviéndose en su interior fuera caótica; entonces se encuentra un hecho asombroso: las propiedades estadísticas de la conductancia en el problema cuántico ¡serían semejantes a las de los sistemas nucleares descritos anteriormente!

También se han estudiado cavidades de microondas con la misma forma que se muestra en la figura 24.5, pero re-escaladas a dimensiones  $\sim 0.5$

m. La propagación de ondas electromagnéticas a través de estas cavidades es un problema de electrodinámica clásica que se puede estudiar numéricamente. Lo que es sorprendente es que, cuando los resultados se analizan estadísticamente, exhiben características semejantes a las de las cavidades cuánticas y a las de los sistemas de la física nuclear.

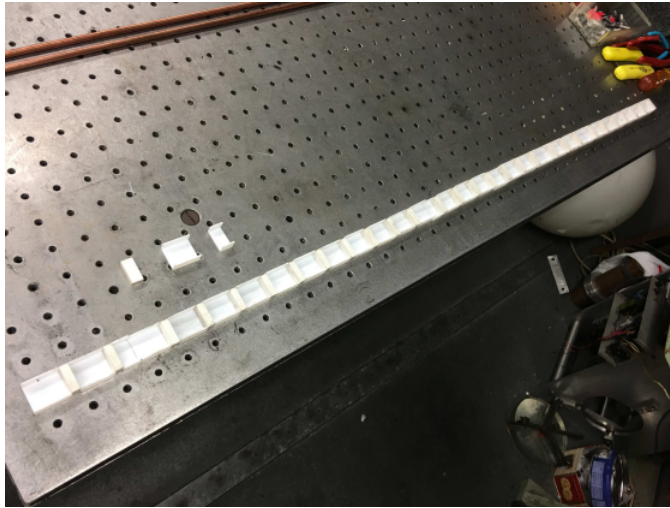
Resumiendo, vemos que las dimensiones de los sistemas que hemos descrito abarcan  $\sim 14$  órdenes de magnitud, desde  $\sim 10^{-14}$  m para un sistema nuclear, pasando por  $\sim 10^{-6}$  m para las cavidades cuánticas, hasta  $\sim 1$  m para la cavidad de microondas, y que ¡un análisis estadístico muestra un comportamiento semejante!

También ha tenido mucho interés en la comunidad científica el estudio de la corriente eléctrica a través de un conductor mesoscópico de largo  $L$  y sección constante  $A$ . La posición de las imperfecciones de la red que constituye el conductor no está bajo nuestro control, de modo que es indispensable un tratamiento estadístico. En las condiciones de tamaño y temperatura de un sistema mesoscópico, la función de onda electrónica es coherente en todo el sistema y cada muestra individual tiene la “huella” de esa configuración del desorden. Ahora bien, una serie de experimentos realizados sobre muchas configuraciones del desorden exhibe características universales. En efecto, los sistemas constituidos por guías de onda electromagnéticas son de dimensiones macroscópicas y exhiben propiedades estadísticas semejantes a las de los conductores mesoscópicos. En la figura 24.6 se muestra una guía de ondas electromagnética utilizada en un experimento reciente por el grupo de A. Genack y colaboradores, en la City University of New York (CUNY), EUA.

Al haber encontrado una descripción unificada de estos fenómenos físicos, el mensaje es que hemos descubierto un comportamiento *universal*. Esta universalidad se puso de manifiesto mediante un análisis estadístico, ya que estudiando los detalles particulares no la veríamos.

¿Cómo se han realizado matemáticamente los estudios que hemos descrito? La idea de un comportamiento universal se ha implementado eligiendo la distribución estadística más frecuente entre aquéllas que cumplen ciertos requerimientos físicos relevantes [1]. En algunos casos se ha podido explicar esa universalidad exhibiendo un *teorema del límite central* [2] generalizado, que prueba la existencia de una distribución límite. De hecho, hay evidencia de que el método de la distribución estadística más frecuente es exitoso cuando hay un teorema de límite central “tras bambalinas”.

¿Qué hacemos si la teoría no coincide con el experimento? Se tiene evidencia de que las discrepancias podrían ser una indicación de que no se



**Figura 24.6:** La guía de ondas electromagnéticas usada por A. Genack y colaboradores en el experimento que se menciona en el texto.

ha tomado en cuenta algún requerimiento físico relevante. Esto fue precisamente lo que ocurrió durante el estudio de los sistemas que se mencionaron en los párrafos anteriores.

#### RESUMEN DE LA FILOSOFÍA DE ESTA PRESENTACIÓN

En cierto sentido, el principio subyacente de esta presentación está contenido en la famosa máxima del filósofo Inglés Guillermo de Occam (1300-1349):

*“Essentia non sunt multiplicanda praeter necessitatem”,*

conocida como la “navaja de Occam”. La afirmación de Occam que, traducida al español, significa literalmente: “Los entes no deben multiplicarse más allá de lo que es necesario”, fue interpretada por el filósofo y matemático británico Bertrand Russell, en su “Historia de la Filosofía Occidental”, de la siguiente manera:

*“Si en una cierta ciencia todo se puede interpretar sin una cierta hipótesis, no hay razón para usarla”.*

PARA SABER MÁS:

- Brody, T.A., Flores, J., French, J.B., Mello, P.A., Pandey, A. y Wong, S.M., ***Random-Matrix Physics: Spectrum and Strength Fluctuations***, Rev. Mod. Phys., **53**, 385 (1981).

REFERENCIAS

- [1] P. A. Mello y N. Kumar, *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: COMPLEXITY and Statistical Fluctuations. A Maximum Entropy Viewpoint*. Oxford University Press, 2010. (visitado 02-05-2020).
- [2] A. Stuart y M. G. Kendall, *The advanced theory of statistics*. London, UK: Griffin, 1969.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙



V

**CAOS Y SISTEMAS COMPLEJOS**



## EL CAOS DINÁMICO

*Rafael Pérez Pascual\**

En el capítulo sobre la mecánica clásica del siglo XX se vio que para la segunda mitad del siglo se había logrado resolver el gran problema que había dejado Poincaré establecido. Esto es, se sabía que los sistemas no integrables existían, que en ellos los comportamientos periódicos que ocurren en los sistemas integrables se rompen y se conocía el teorema de KAM, teorema que establece como el comportamiento cuasiperiódico de los sistemas integrables va desapareciendo paulatinamente a medida que un sistema se aleja de ser integrable. Esto es, se conocía que el comportamiento de los sistemas no integrables era muy distinto del de los integrables, pero se desconocía cual era ese comportamiento. En este capítulo resumiremos lo que en la segunda mitad del siglo XX se reveló sobre el comportamiento de los sistemas no integrables, un conjunto de propiedades que llamamos «caos dinámico».

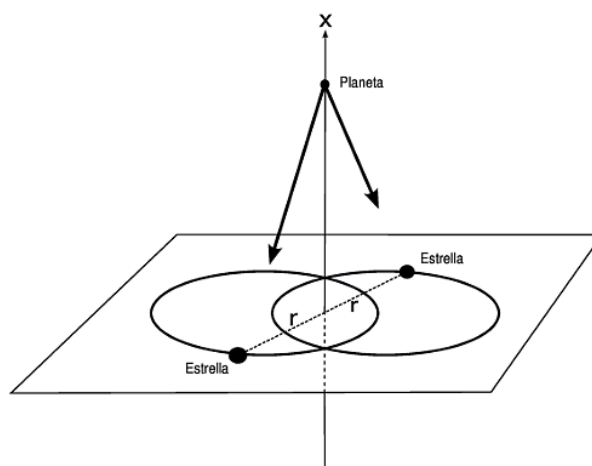
Durante la primera mitad del siglo XX se presentaba una dificultad muy seria en el estudio de los sistemas mecánicos no integrables: la ausencia de ejemplos que se hubieran resuelto, ya fuese con métodos analíticos o numéricos. Durante las primeras décadas de la segunda mitad del siglo se lograron grandes avances en matemáticas y en el desarrollo de la computadora como un arma heurística, lo que permitió adentrarnos en el comportamiento de dichos sistemas y se llegar a resultados realmente sorprendentes y trascendentes. Para ilustrar estos comportamientos usaremos un ejemplo, se trata de un caso restringido del problema de tres cuerpos que fue estudiado por Sitnikov, Alekseev, Mc Gehee y Moser.

Tomemos un sistema binario de estrellas, de la misma masa, que orbitan en torno a su centro de masas, por lo que las órbitas serán dos elipses copla-

---

\*Departamento de Física Cuántica y Fotónica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

nares idénticas colocadas simétricamente con respecto al centro de masas (ver figura 25.1).



**Figura 25.1:** El sistema de Sitnikov y Alekseev.

Consideremos ahora un pequeñísimo planetóide de masa mucho menor que la de las estrellas, de tal suerte que podemos aproximar el sistema considerando que la fuerza de gravedad de las estrellas actúa y acelera al planetóide, mientras que la aceleración producida la gravedad del planetóide sobre las estrellas resulta totalmente despreciable, por lo que podemos decir que éstas continuarán en sus órbitas elípticas estrictamente keplerianas. Pensemos también que, en un cierto tiempo inicial, el planetóide estaba sobre la línea perpendicular al plano de las órbitas de las estrellas que pasa por el centro de masas y que tenía una velocidad inicial en la dirección exacta de esa recta. Las estrellas están colocadas de manera simétrica respecto al centro de masas por lo que la componente sobre el plano de las órbitas de la atracción gravitacional de una de las estrellas se anulará con la de la otra y la fuerza total que actúa sobre el planetóide estará siempre sobre dicha recta y apuntará en la dirección del centro de masas. El movimiento del planetóide será entonces sobre la recta y oscilatorio en torno del centro de masas.

Resulta sencillo calcular la fuerza resultante:

$$F = -\frac{2GMmx}{[x^2 + r(t)^2]^{\frac{3}{2}}},$$

donde  $x$  representa la posición del planetóide en la recta,  $M$  y  $m$  la masa

de las estrellas y la del planetóide,  $G$  la constante de gravitación y  $r(t)$  la distancia de las estrellas al centro de masas, que, en general cambia con el tiempo y puede calcularse a partir de la solución del problema de Kepler de dos cuerpos.

En caso de que las órbitas fueran circulares, esto es con excentricidad cero,  $r$  será una constante y el sistema resultará ser integrable, por lo que las oscilaciones del planetóide serán periódicas o cuasiperiódicas<sup>1</sup>. Ahora, si la excentricidad de las órbitas es distinta de cero,  $r$  ya no será constante y el sistema se hace no integrable.

En el caso no integrable el movimiento del planetóide será también oscilatorio, el planetóide pasará de un lado del plano al otro y regresará, pero no lo hará de manera periódica o cuasiperiódica; resulta que esta oscilación es mucho más compleja y extraña. Veamos esto con detenimiento.

Una forma de estudiar el movimiento oscilatorio del planetóide es tomar el intervalo de tiempo que transcurre entre dos sus pasos sucesivos por el plano. Tendremos así una sucesión de tiempos digamos  $\dots, \tau_{-2}, \tau_{-1}, \tau_0, \tau_1, \tau_2, \dots$ , desde luego esta sucesión está determinada por la situación mecánica del sistema y las condiciones iniciales. Tomemos ahora una sucesión cualquiera, arbitraria de números reales  $\dots, s_{-2}, s_{-1}, s_0, s_1, s_2, \dots$ ; se ha demostrado que dada la sucesión arbitraria de números reales, existen condiciones iniciales para el planetóide, esto es una posición  $x_0$  y una velocidad  $\dot{x}_0$  al tiempo  $t_0$ , tales que la sucesión de intervalos de tiempo entre pasos sucesivos del planetóide por el centro de masas, reproduce exactamente la sucesión de números reales dada. Para aclarar el significado de esto veamos algunos casos:

Para una sucesión periódica de números reales como

$$\dots, 8.3, 234.6, 8.3, 234.6, 8.3, 234.6, \dots,$$

ocurrirá que, con las condiciones iniciales adecuadas, el planetóide describirá una órbita periódica con exactamente esos tiempos. Pero si la sucesión es

$$\dots, 8.3, 234.6, 8.3, 234.6, 8.3, 234.6,$$

<sup>1</sup>Periódicas o cuasiperiódicas en el siguiente sentido: el sistema tiene un período natural, el del movimiento de las estrellas, y otro período, el del movimiento del planetóide, que depende de las condiciones iniciales. El movimiento del planetóide resulta periódico visto desde el centro de masas, pero considerando el sistema completo el movimiento total será periódico únicamente si el período del planetóide y el de las estrellas son conmensurables, lo que ocurrirá en casos muy excepcionales. El movimiento total será cuasiperiódico cuando los dos períodos sean inconmensurables. Éste es el caso genérico.

que es casi la anterior excepto que ahora es finita por la derecha, entonces, dadas las condiciones iniciales correspondientes, el planetóide, después de pasar multitud de veces por el centro de masas en los tiempos indicados, escapa al infinito y no vuelve a pasar jamás por el centro de masas. Nótese que esto implica que, si se ha observado por muchos ciclos al planetóide y se tiene como datos la sucesión de intervalos de tiempo entre pasos por el centro de masas, no es posible calcular el tiempo del siguiente paso, pues las condiciones pudieron haber sido las que dan origen a la órbita periódica o las que determinan que en un momento dado escape al infinito o cualquier otra que, habiendo recorrido inicialmente las del ejemplo, continúe de alguna otra manera, por ejemplo

$\dots, 8.3, 234.6, 8.3, 234.6, 8.3, 234.6, 15.3, 354.2, 27.1, 3.14159, \dots$

Si la sucesión es totalmente aleatoria, también habrá condiciones iniciales tales que los intervalos de tiempo entre pasos sucesivos del planetóide por el centro de masas la reproduzcan. Ahora, al observar al planetóide y tomar esos tiempos, no podremos distinguir si son producto del azar o, como es el caso, producto de un sistema totalmente determinista. Es más, el teorema nos enseña que hay una correspondencia entre el conjunto de las parejas de números reales (posición y velocidad iniciales) y el de todas las sucesiones de números reales. Ahora en el conjunto de sucesiones tendremos una infinidad de ellas periódicas, por lo que hay una infinidad de movimientos periódicos del planetóide. En adición a esto tenemos que el subconjunto de sucesiones aleatorias tiene medida uno en el conjunto de todas las sucesiones, lo que implica que, en la absoluta mayoría de los casos, el planetóide, generará una sucesión indistinguible de una aleatoria. Por otra parte el subconjunto de sucesiones periódicas es denso aunque tenga medida cero, lo que implica que pequeños cambios en las condiciones iniciales pueden generar enormes diferencias en el comportamiento del planetóide. Es importante destacar que se tiene una demostración formal de que este sistema presenta el comportamiento aquí descrito. Cuando un sistema mecánico presenta trayectorias con estas características se dice que es un sistema caótico o que presenta el fenómeno del caos determinista o dinámico.

Podemos entender con mayor claridad este comportamiento dinámico en un sistema más simple que el problema de tres cuerpos. Tomamos un ejemplo muy simple, se trata de un sistema dinámico discreto, la iteración de un mapeo del círculo en si mismo. Este ejemplo no es hamiltoniano, pero muestra con gran claridad el fenómeno del caos dinámico.

Consideremos el círculo parametrizado en el intervalo unitario por el ángulo  $\theta \in [0, 1)$  y un mapeo dado por

$$\theta' = 2\theta \pmod{1},$$

esto es duplicamos el círculo y lo colocamos sobre el mismo. El sistema dinámico generado por este mapeo será el resultado de la aplicación iterada del mapeo a un punto inicial  $\theta_0$  produciendo una órbita  $\theta_0, \theta_1, \theta_2, \dots$  por medio de

$$\theta_{i+1} = 2\theta_i \pmod{1}.$$

Este sistema no preserva el volumen<sup>2</sup>, ya que un intervalo de longitud  $\delta$  en el círculo se mapea en un intervalo de longitud  $2\delta$ , de hecho, esto muestra que no se trata de un sistema hamiltoniano. Vemos también que no se puede recorrer en sentido inverso, ya que el mapeo inverso no está bien definido. Ahora bien, el sistema es tan simple que podemos resolverlo: dado  $\theta_0$ ,  $\theta_n = 2^n \theta_0 \pmod{1}$ . Esta simplicidad no implica que no sea interesante, veamos por qué.

Notamos que el mapeo tiene un punto fijo  $\theta = 0$ , por lo que el cero constituye una órbita de período uno; tiene también órbitas que después de un número finito de iteraciones aterrizan en el punto fijo, por ejemplo la que inicia en  $\theta_0 = 1/4$ ; en la primera iteración tendremos  $\theta_1 = 1/2$  y en la siguiente  $\theta_2 = 0$ , a partir de aquí todas serán cero, ya que la órbita llegó al punto fijo. Hay también órbitas periódicas distintas al punto fijo, por ejemplo si  $\theta_0 = 1/3$ ,  $\theta_1 = 2/3$  y  $\theta_3 = 4/3 \pmod{1} = 1/3$ , a partir de aquí se repetirá lo mismo indefinidamente, esto es una órbita de período dos. Hay órbitas que después de un cierto número de iteraciones convergen a una periódica, por ejemplo, es fácil ver que si  $\theta_0 = 19/24$  después de tres pasos se llega a la órbita del ejemplo anterior de período dos. Es también fácil ver que habrá órbitas periódicas de cualquier período.

Más sorprendente es que este sistema tiene propiedades similares a las del sistema de Sitnikov y Alekseev. Dividamos el círculo en dos partes,  $\theta \in [0, 0.5)$  y  $\theta \in [0.5, 1)$ ; si al ir iterando el mapeo,  $\theta$  cae en el primer intervalo le asociamos la letra  $I$  o cualquier otro símbolo, si cae en el segundo le asociamos la letra  $D$  o cualquier otro símbolo distinto del primero; ahora, dado un punto inicial, podemos construir una sucesión de esos dos símbolos según vaya cayendo la órbita en uno u otro intervalo. A la secuencia que se obtiene le llamamos el itinerario de dicho punto inicial. Podemos demostrar el siguiente resultado: Dada cualquier sucesión, finita o infinita, de los

<sup>2</sup>En este caso sería mejor decir longitud pues el espacio fase es unidimensional.

símbolos  $I$  y  $D$ , existe una condición inicial  $\theta_0$  tal que su itinerario reproduce la sucesión dada. Esto es totalmente similar al caso del planetóide de Sitnikov y Alekseev: tenemos sucesiones periódicas de cualquier período, sucesiones que comienzan igual y luego se separan, sucesiones que después de un cierto número de pasos se hacen periódicas, sucesiones que, por un tiempo parecen periódicas y después dejan de serlo y sucesiones aparentemente aleatorias; todas pueden ser generadas por este sistema dinámico, basta comenzar en una condición inicial adecuada. Naturalmente todos los problemas de predictibilidad que se tienen en el caso del planetóide se reproducen aquí, la única diferencia está en que en este caso el mapeo no es invertible. Ahora, lo sencillo que resulta el sistema, hace que en este caso la demostración sea simple. Pasemos entonces a demostrar que el sistema presenta el comportamiento antes descrito.

Expresemos la variable  $\theta$  en sistema binario, entonces  $\theta = 0.a_1a_2a_3\dots$ , donde las  $a$  son cero o uno. Ahora, en sistema binario, multiplicar por dos es lo mismo que recorrer el punto un lugar a la derecha, así  $2\theta = a_1.a_2a_3\dots$ . Por otro lado la operación de tomar módulo uno equivale a poner cero en lo que quede a la izquierda del punto. Así tendremos que, en sistema binario, el mapeo se expresa como  $2\theta \pmod{1} = 0.a_2a_3\dots$ , esto es, el mapeo equivale a la operación de recorrer el punto un lugar a la derecha e igualar a cero lo que quede a la izquierda del punto. Naturalmente, dada una sucesión cualquiera de ceros y unos, podemos generar una condición inicial sobre el círculo,  $\theta_0$ , simplemente construyendo el número real correspondiente en sistema binario; al aplicar el mapeo a esta condición inicial e iterar se reproducirá la sucesión en la cifra que quede a la derecha del punto. Recordamos que cuando esta cifra es cero  $\theta \in [0, 0.5)$  y cuando es uno  $\theta \in [0.5, 1)$ ; queda así demostrado que el sistema presenta el comportamiento descrito.

Ahora podemos explorar al sistema ya que las propiedades de las órbitas se identifican con las propiedades de la expansión binaria de los números reales contenidos en el intervalo unitario. Veamos esto.

Si comienzo en un número racional su expresión binaria será finita, periódica o comenzará con un número finito de dígitos para pasar a ser periódica; en el primer caso, después de un tiempo finito (un número finito de pasos), la órbita cae en cero y se hace periódica de período uno, en el segundo la órbita resulta periódica y en el tercero después de un tiempo finito se hace periódica. Vemos entonces una asociación entre la cualidad de ser un número racional y la de periodicidad de las órbitas; notamos también que toda órbita periódica genera una expansión binaria periódica de los puntos que la componen y por tanto su cualidad de ser números racionales o sea la



asociación es total. De esto se deduce que las propiedades del conjunto de todas las órbitas periódicas o convergentes a una periódica son las del conjunto de los racionales en los reales, por ejemplo el conjunto es denso<sup>3</sup>, hay órbitas periódicas de cualquier período y el conjunto tiene la cardinalidad de los naturales por lo que ocupa medida cero.

En el caso de los irracionales, que son genéricos entre los reales, tenemos que su expansión binaria es necesariamente aperiódica, por lo que las órbitas correspondientes también lo serán, y las órbitas aperiódicas serán genéricas. Ahora bien, los irracionales pueden ser divididos en dos categorías, aquellos que pueden especificarse por un número finito de bits de información y los que únicamente pueden especificarse utilizando una cantidad infinita de bits de información. Ejemplos de los primeros son las raíces de los números enteros que no sean un cuadrado perfecto, como  $\sqrt{2}$ ; de hecho al decir raíz de dos especifico un número irracional usando muy pocos bits de información y cualquiera puede, a partir de la especificación, generar su expansión binaria dígito a dígito. Esto lo podemos extender a todos los irracionales que sean la raíz de un polinomio con coeficientes enteros, pero no sólo de ellos, pues  $\pi$ , o  $e$  son trascendentes y pueden especificarse de manera finita. Otros ejemplos son aquellos que se especifican por medio de su expansión binaria o decimal, por ejemplo puedo decir “el número cuya expansión binaria es 0.110110011000110000... y continua indefinidamente siguiendo el patrón de dos unos seguidos de ceros en una cantidad uno mayor a la que ocurrió en el ciclo anterior”, notamos que se ha especificado un irracional con un número finito de bits.

Por otro lado tenemos los irracionales que no se pueden especificar usando un número finito de bits, o sea la especificación de cualquiera de ellos resulta una imposibilidad práctica, pues no se puede dar la secuencia infinita de sus dígitos ni una regla finita para obtenerlos.

Sabemos que el conjunto de los especificables es no numerable pero que tiene medida cero, esto es, son muchísimos más que los racionales, pues tiene la cardinalidad de los reales, pero no ocupan medida, de hecho toda la medida queda ocupada por los no especificables. Otra posible propiedad es la de ser “normal”; decimos que un número real es normal si la distribución de los dígitos en su expresión en cualquier base es constante e igual a uno sobre la base, la distribución de las parejas de dígitos es también constante y uniforme, lo mismo para las triadas y así sucesivamente. Esta condición la cumplen las sucesiones aleatorias, esto es, si se toman los dígitos totalmente al azar y se forma con ellos una sucesión infinita, el número resultante será

<sup>3</sup>Tan cerca como queramos de un punto del círculo pasa una órbita periódica.

normal<sup>4</sup>. Una propiedad interesante de los números normales es que la sucesión de sus dígitos contiene todas las sucesiones finitas; esto implica que toda órbita del sistema dinámico que estamos estudiando que tenga como condición inicial un número normal es ergódica, esto es, pasará tan cerca de cualquier punto del círculo como se quiera. Vemos como las propiedades de éste sistema dinámico son consecuencia de las de los número reales, esto significa que están arraigadas en la base misma de las matemáticas.

Ahora bien, el ejemplo que usamos, como hemos dicho, no tiene las características de los sistemas mecánicos hamiltonianos, en primer termino porque no es invertible, y en segundo porque no preserva el volumen; pero podemos extenderlo a un ejemplo que si posee esas características y que llamamos el mapeo del panadero. Pasemos pues a ver este ejemplo.

El espacio fase  $EF$  es un cuadrado unitario de dos dimensiones, por lo que usaremos unas coordenadas  $(x, y)$  con  $x, y \in [0, 1)$  para determinar los puntos de dicho espacio. El mapeo del panadero  $M : EF \rightarrow EF$  lo construimos de la siguiente manera: tomamos el cuadrado unitario y hacemos una expansión por duplicación en la dirección  $x$  al tiempo que contraemos en la dirección  $y$  reduciendo a la mitad; el cuadrado unitario será ahora un rectángulo de lado  $x$  dos y lado  $y$  un medio, pero notamos que el área total es la misma. Lo mismo podemos decir de cualquier región del espacio fase: la expansión acompañada de contracción la habrán deformado, pero el área será la misma. Una vez hecho esto cortamos el rectángulo a lo largo de la línea  $x = 1$ , obtenemos dos rectángulos con lados uno y un medio, tomamos el que nos queda a la derecha y lo colocamos arriba del de la izquierda; con esta operación tendremos un mapeo del cuadrado unitario en si mismo que preserva área y es biunívoco, o sea, invertible, por lo que, en el campo de los sistemas dinámicos discretos, genera un sistema hamiltoniano. Podemos expresar el mapeo de la siguiente forma

$$x_{i+1} = 2x_i \bmod(1)$$

$$y_{i+1} = \begin{cases} \frac{y_i}{2} & \text{si } x_i \leq \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}(y_i + 1) & \text{si } x_i > \frac{1}{2} \end{cases}.$$

Al iterar este mapeo obtenemos un sistema dinámico en dos dimensiones cuyas órbitas tendrán, con respecto a la coordenada  $x$ , el mismo comportamiento que encontramos en el ejemplo anterior. Pasemos a estudiar las órbitas de este mapeo.

---

<sup>4</sup>Muchos de los criterios para ver si una sucesión es aleatoria se basan en esto: simplemente se cuenta cuantas veces aparece cada dígito y deben resultar iguales, lo mismo para las parejas y así sucesivamente.

Podemos identificar los puntos del espacio fase por las coordenadas  $(x, y)$ , pero también lo podemos hacer usando un solo número real, veamos. Expresamos  $x$  y  $y$  en sistema binario, entonces

$$x = 0.x_1x_2x_3 \cdots ,$$

$$y = 0.y_1y_2y_3 \cdots ,$$

con  $x_i$  y  $y_i$  cero o uno; ahora construimos un número real con los dígitos de  $x$  expresando su parte no entera y con los de  $y$  su parte entera, esto es construimos el número real

$$\alpha = \cdots y_3y_2y_1.x_1x_2x_3 \cdots ,$$

vemos que esto establece una correspondencia biunívoca entre los números reales y los puntos del cuadrado unitario, por lo que es lo mismo usar las coordenadas o usar los reales para identificar los puntos del espacio fase. Ahora el mapeo lo podemos expresar como un mapeo de los reales en los reales  $\alpha_{i+1} \rightarrow \alpha_i$ , si  $\alpha_i = \cdots y_3y_2y_1.x_1x_2x_3 \cdots$  resulta ser

$$\alpha_{i+1} = \cdots y_3y_2y_1x_1.x_2x_3 \cdots ;$$

esto es recorrer el punto “decimal” un lugar a la derecha, o lo que es lo mismo multiplicar  $\alpha_i$  por dos. Esto es fácil de ver ya que en términos de las coordenadas obtendremos el punto  $(0.x_2x_3 \cdots , 0.x_1y_1y_2y_3 \cdots)$ , el que, en binario, expresan las fórmulas que dimos para el mapeo. El mapeo del panadero resulta ser un corrimiento del punto decimal un lugar a la derecha de los números reales expresados en binario y esto lo podemos interpretar como un mapeo de la recta real en si misma, por lo que tenemos dos sistemas dinámicos, uno cuyo espacio fase es el cubo unitario y otro cuyo espacio fase es la recta real, pero los dos los podemos expresar con la misma fórmula, corrimiento del punto decimal y por lo tanto sus órbitas tendrán propiedades idénticas; en general cuando esto ocurre entre dos sistemas dinámicos decimos que son topológicamente conjugados.

Ahora podemos estudiar el sistema del panadero estudiando el del corrimiento del punto “decimal”. Dado un entero cualquiera podemos construir una sucesión de ceros y unos de esa longitud y construir la sucesión infinita que resulta de repetir la primera indefinidamente. Si ponemos un punto entre dos de dichas sucesiones obtenemos un número real en sistema binario, el que podemos interpretar como un punto del cubo unitario. La aplicación del mapeo es el corrimiento del punto “decimal”, por lo que

al aplicarlo tantas veces como el número original se producirá la misma sucesión, o sea, el mismo punto del cubo unitario; vemos que la órbita que comienza en el punto es periódica con período dado por el número. Hemos demostrado que el sistema del panadero tiene órbitas periódicas de cualquier período.

Otro resultado importante se refiere a la evolución de una región del espacio fase. Como el sistema del panadero preserva el área, al aplicar el mapeo a una región ésta se mapeará en otra región que puede resultar no conexa, pero que abarcará la misma área; ahora, al continuar aplicando el mapeo, la imagen de la región permanecerá con la misma área, pero se irá esparciendo o dispersando por el espacio fase de tal manera que, después de un número finito de pasos, intersectará a cualquier otra región finita por pequeña que ésta sea, esto a pesar de que seguirá cubriendo la misma área que la región original. Hacer ver esto es fácil, ya que dado cualquier punto del cuadrado unitario  $(x, y)$  puedo aproximar tanto como se quiera el número real que lo representa por dos sucesiones de ceros y unos, esto es con los primeros  $n$  dígitos de la expresión binaria de sus coordenadas<sup>5</sup>; ahora, dado un punto inicial y una vecindad de él, entre los puntos en esa vecindad habrá aquellos cuyas coordenadas después de  $m$  dígitos tengan las dos sucesiones de  $n$  dígitos anteriores tomadas las de  $y$  en sentido inverso y, a continuación, las de  $x$ , en sentido directo; esos puntos después de  $n + m$  iteraciones estarán en una vecindad de  $(x, y)$  de radio menor a  $2^{-n}$ . Esta propiedad hace que toda región por pequeña que sea, sin ganar ni perder área, se “diluya” por el espacio fase y tienda a tener una densidad homogénea, desde luego tendiente a la razón del área unitaria del cuadrado al área de la región; ésta región está construida como una serie de pedacitos filamentosos muy largos pero muy finos y que se encuentran sumamente enredados. Desde luego esto implica la existencia de órbitas ergódicas, pero va más allá de eso, implica el ser “mixing” o de mezcla, propiedad básica para la mecánica estadística. En términos matemáticos a esta propiedad se le llama transitividad topológica. Muchos de las características de los sistemas dinámicos que llamamos caóticos son consecuencia de esta propiedad.

El mapeo del panadero no es continuo y por ello hay regiones conexas que se mapean en pedazos<sup>6</sup>, pero es posible generalizarlo a mapeos continuos que preservan volumen con las mismas propiedades dinámicas básicas: alta sensibilidad a condiciones iniciales, presencia de órbitas periódicas.

---

<sup>5</sup>  $n$  tendrá que ser suficientemente grande como para que  $2^{-n}$  sea menor que la aproximación que deseamos.

<sup>6</sup> Lo utilizamos como ejemplo por ser el más simple de estudiar.

dicas correspondientes a todos los períodos y transitividad topológica. Un ejemplo es el mismo mapeo al que en vez de cortar y colocar arriba, simplemente lo doblamos hacia arriba y lo colocamos. Podemos diseñar muchos otros mapeos, todos tendrán esas tres propiedades dinámicas ya que ellas dependen más de la topología del mapeo que de sus detalles cuantitativos.

En general los sistemas dinámicos, ya sean discretos o continuos, esto es, sean iteración de mapeos o ecuaciones diferenciales, y ya sean hamiltonianos o no, pueden presentar estas tres propiedades y de hacerlo mostrarán dinámicas sumamente complejas que llamamos caos dinámico o, simplemente, diremos que son caóticos. También es general el hecho de que los sistemas dinámicos caóticos contienen un subsistema dinámico o se pueden reducir a un sistema que resulta topológicamente conjugado a un corrimiento de Bernoulli, esto es a un sistema cuyo espacio fase consiste de un espacio métrico cuyos puntos son secuencias de símbolos, finitas o infinitas, separadas por una marca y cuya dinámica consiste de un corrimiento de esa marca. De las características de estos corrimientos se derivan las características de los sistemas dinámicos caóticos. De hecho lo que hacen Sitnikov y Alekseev en el análisis del sistema de las estrellas binarias y el planetóide es demostrar que una sistema derivado de él es topológicamente conjugado a un corrimiento de Bernoulli, de ahí deducen la extraña propiedad de la sucesión de pasos del planetóide por el plano de las órbitas de las estrellas. Aunque decimos extraña propiedad, sabemos que no es más extraña que el comportamiento de la sucesión de dígitos en la expresión decimal de un número irracional normal, esto es de un número “común y corriente”.

En resumen los sistemas dinámicos y en particular las ecuaciones diferenciales, presentan de manera genérica el fenómeno del caos dinámico. Esto implica que sus soluciones presentan alta sensibilidad a condiciones iniciales, por lo que, si conocemos unas condiciones iniciales con cierta precisión  $\delta$  podremos conocer su situación con cierta precisión hasta un cierto tiempo después, pero si queremos conocer la situación un tiempo  $n$  veces más largo debemos conocer la condición inicial con una precisión  $\delta^n$ , esto es la precisión requerida crece exponencialmente o lo que es equivalente, el tiempo al que podemos conocer el sistema crece logarítmicamente con la precisión con que conocemos la condición inicial. Esto hace prácticamente imposible conocer el destino de un sistema a tiempos largos. Todo sistema dinámico caótico tienen también comportamientos sumamente simples, como las soluciones periódicas, pero son muy raras; de hecho, no se pueden observar en la práctica ya que se requiere especificar las condiciones iniciales con toda precisión y esto es imposible; además están aisladas, por lo

que cualquier desvío nos lleva a soluciones en general caóticas que se alejan rápidamente de la periodicidad. En un tercer aspecto, se presenta la característica que llamamos transitividad topológica<sup>7</sup> o que es “mixing”: cualquier vecindad de un punto del espacio fase por pequeña que sea se dispersará con el tiempo y tenderá a distribuirse de una manera homogénea por el espacio al que físicamente tenga acceso. Esto último debido a que hay casos con restricciones, por ejemplo la presencia de cantidades conservadas, como la energía. Pensemos en un sistema hamiltoniano y una pequeña vecindad tal que los estados de la vecindad tienen energías comprendidas entre dos límites, como la energía es invariante, la vecindad al transcurrir el tiempo se esparce, pero solo sobre la subregión de energías comprendidas entre los dos límites, eso sí, dentro de esa región la vecindad se expande y tiende a distribuirse homogéneamente. Algo similar ocurre en el caso de un sistema con atractores, esto es subregiones de dimensión menor a la del espacio fase a las que las soluciones de un sistema dinámico tienden asintóticamente. En estos casos la vecindad tiende a la subregión por lo que su volumen tiende a cero, pero, asintóticamente, tiende a una densidad homogénea en dicha subregión o atractor. Para los sistemas caóticos estas subregiones atractoras no son variedades diferenciales, tienen que ser objetos que resultan del producto cartesiano de una variedad diferencial por conjuntos de Cantor, por lo que su dimensión será no entera y presentarán propiedades fractales; se les llama atractores extraños y un ejemplo clásico es el atractor de Lorentz.

Las implicaciones de todo lo anterior son enormes, los conceptos mismos de predictibilidad, de fenómeno azaroso y de determinismo requieren revisarse. Resulta que hay sistemas físicos deterministas para los que no podemos predecir su comportamiento a tiempos largos; que pueden presentar comportamientos indistinguibles del azar y que al tener un conjunto hecho de sistemas cuyo estado físico es muy similar, esto es, estados que constituyen una pequeña región del espacio fase, con el tiempo tienden a cubrir todo el espacio fase, es decir, pierden su coherencia, se dispersan, o sea como conjunto se hacen indistinguibles de cualquier otro conjunto semejante. Podemos decir entonces que tienden a una especie de equilibrio en el sentido termodinámico.

Pareciera que el toparnos con un sistema de éstos le pone fin a nuestro estudio, no podemos más que predecir a corto plazo, por ejemplo. Pero hay detrás de esto mucho por hacer y estudiar, no sólo en el sentido del

---

<sup>7</sup>Formalmente decimos que un sistema presenta transitividad topológica si dadas cualesquiera dos vecindades del espacio fase, hay en una de ellas un punto tal que la trayectoria que comienza en él alcanzará, en un tiempo finito, a pasar por la otra vecindad.

estudio de casos particulares importantes, sino en el terreno de lo general, clasificando estos comportamientos, profundizando su entendimiento, relacionando esto con la física estadística y muchas otras cuestiones que seguramente surgirán en el futuro de manera tan inesperada como surgió el caos dinámico en el seno mismo de una ciencia que muchos consideraban agotada, la mecánica clásica.

PARA SABER MÁS:

- J. Moser, *Stable and random motions in dynamical systems*, Princeton University Press, 2001.
- Rasband, S. Neil, *Dynamics*, Wiley, 1983.
- P. Cvitanovic, R. Artuso, E R. Mainieri, G. Tanner, G. Vattay, N. Wadhan y A. Wirzba, *Chaos: classical and quantum*, Copenhagen: Niels Bohr Institute, Chaos: 2018.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙



## LOS SISTEMAS COMPLEJOS

*Octavio Miramontes\**

Uno de los problemas abiertos más importantes en la física contemporánea concierne al origen de las leyes físicas. A la par del desarrollo de la física no lineal y de la termodinámica fuera del equilibrio, existe un pensamiento cada vez más influyente que sugiere que las leyes físicas son el resultado de fenómenos emergentes y autoorganizados. Por lo tanto, estos dos conceptos serían fundamentales en el entendimiento de todo proceso físico. Ambos, son el tema de estudio de una nueva física para el siglo XXI: la física de los sistemas complejos; entendidos como aquellos donde las interacciones no lineales entre numerosos elementos similares generan propiedades colectivas nuevas en escalas de tiempo y espacio diferentes a aquellas de la definición microscópica. Tales propiedades son irreducibles a los elementos constituyentes considerados por separado. Esta fenomenología —la complejidad— es la responsable de la generación de todo el orden que observamos en la Naturaleza, desde la materia condensada, las estructuras de gran escala del universo, la vida, la cognición y la dinámica de sociedades.

La ciencia de nuestros días ha fijado una fecha para el origen del Universo: se habría originado hace unos 13 700 millones de años [1] en un posible evento producido por las fluctuaciones del vacío cuántico [2]. En los primeros instantes del Universo, aproximadamente a los  $10^{-36}$  segundos, la materia se habría creado y se daría inicio a la expansión del Universo que observamos en la actualidad (época inflacionaria). Antes de este tiempo, en la llamada época de Planck ( $10^{-46}$  s), desconocemos exactamente que tipo de física dominaba. Desconocemos también en que momento las leyes de la física fueron creadas o si estas ya existían antes del origen del Universo. Como el lector puede imaginar, esto nos lleva rápidamente al árido terreno

---

\*Departamento de Sistemas Complejos, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

de la especulación filosófica. Pero desde la ciencia se continúan aportando teorías fecundas y una de ellas nos dice que algunas de las leyes más fundamentales de la física, por lo menos la mecánica cuántica, podrían ser *emergentes* [3-5]. ¿Esto que significa?

La emergencia es la aparición de nuevos ordenes espacio-temporales donde no existían previamente. No se trata de magia sino de un mecanismo fundamental en la naturaleza que genera nuevas estructuras, nuevas funciones, nuevos principios. Es un proceso sumamente importante y perfectamente entendible para la física. Pero durante mucho tiempo su comprensión científica fue infructuosa. La rama de la física contemporánea que estudia este fenómeno, junto a otro emparentado: la *autoorganización*, es la física de los *sistemas complejos*. La emergencia de nuevos ordenes en la naturaleza ocurre cuando en un sistema existen condiciones de desequilibrio termodinámico, más aún, cuando esta emergencia ocurre sin la intervención de fuerza o agentes externos o sin planos previos de antemano, se dice que ocurre de manera autoorganizada.

Una forma particular de autoorganización, que facilita la emergencia de propiedades extremadamente importantes en un sistema complejo, sucede cuando el sistema se autoorganiza y ajusta sus propios parámetros para situarse en la cercanías de una transición de fase, por ejemplo, una transición entre orden y desorden (el paso de sólido a líquido, la magnetización del hierro, etc.). A ello se le conoce como *criticalidad autoorganizada*. Se sospecha fuertemente que la tectónica de placas que produce los terremotos, el disparo de neuronas en el cerebro, las crisis financieras y las caídas de los mercados, son todos ellos procesos de este tipo. Nótese la aparente disparidad entre estos sistemas.

#### INTERDISCIPLINA Y COMPLEJIDAD

Recordemos la experiencia de Galileo en la torre de Pisa<sup>1</sup>. Galileo habría experimentado con la caída libre de bolas de distintos materiales y observado que, independientemente del material, las bolas de madera o de cera llegarían al suelo al mismo tiempo. La explicación de lo anterior lo da la Ley de Gravitación de Newton, formulada posteriormente a los experimentos de Galileo. Diríamos que una masa puntual atrae a cualquier otra masa puntual con una fuerza que actúa sobre la línea recta que intersecta las dos masas y cuya magnitud es proporcional al producto de las dos masas e in-

---

<sup>1</sup>No existe un acuerdo entre los historiadores de la ciencia, sobre si el experimento realmente sucedido o si fue solo un experimento mental.

versamente proporcional al cuadrado de la distancia que las separa. Nótese que esta formulación no especifica la constitución material de los objetos. Valdría la misma ley universal para objetos de madera, hierro o vidrio. Algo semejante experimenta la ciencia de los sistemas complejos en nuestros días. Estudia la dinámica común, es decir, las llamadas propiedades genéricas, de sistemas de diversa índole, sin importar sus detalles materiales, desde la física cuántica hasta la sociología, la historia o la economía, descubriendo los principios físicos comunes a todos ellos. Debido a ello, se piensa comúnmente que los sistemas complejos son una ciencia interdisciplinaria; pero no caigamos en el error de pensar que se trata de una mera aplicación de la física a otras disciplinas. La nueva ciencia de los sistemas complejos es parte de la física más fundamental que intenta explicar teóricamente la emergencia de fenómenos generales.

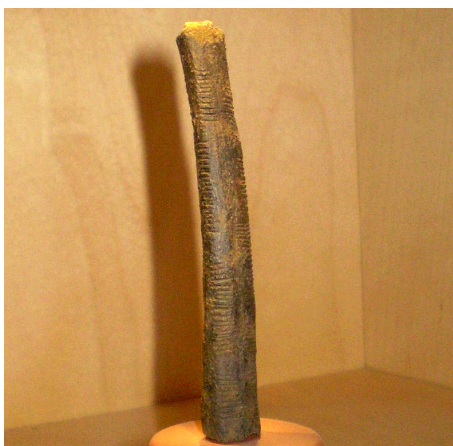
## EMERGENCIA Y AUTOORGANIZACIÓN

### Aritmética

Veamos algunos ejemplos sencillos de distintos tipos y comencemos con un ejemplo sencillo de aritmética. Las operaciones aritméticas básicas son la suma (+), la resta (-), la multiplicación ( $\times$ ) y la división ( $\div$ ). El conjunto de números más sencillo donde se aplican estas operaciones son los números naturales o enteros positivos. El 8, el 405 y el 345 son todos números naturales y los denominamos como el conjunto  $\mathbb{N}$ . Entonces  $2 + 4 = 6 \in \mathbb{N}$  significa que la suma de dos números naturales es un número natural y lo mismo con la multiplicación:  $2 \times 4 = 8 \in \mathbb{N}$ ; la resta:  $4 - 2 = 2 \in \mathbb{N}$  y la división:  $4 \div 2 = 2 \in \mathbb{N}$ . Hasta aquí todo va bien, en lo que podríamos llamarla la aritmética de los dedos, porque podemos fácilmente hacer estas operaciones contando con los dedos de las manos. Pero nuestros antepasados, hace cientos de miles de años debieron encontrarse con una dificultad respecto a la resta. Supongamos que la operación es ahora  $2 - 4 = -2 \notin \mathbb{N}$ . Es decir, en la mente de nuestros antepasados debió emerger otro concepto numérico abstracto: los números negativos que junto a los enteros positivos pasarían a formar el conjunto de los números enteros  $\mathbb{Z}$  es decir  $2 - 4 = -2 \in \mathbb{Z}$ . Pero la aritmética sencilla deja de ser "sencilla" cuando se considera a la división. Pensemos en las planicies africanas hace cientos de miles de años e imaginemos un padre de tiene 3 frutas y debe dividir las entre 4 hijos. Entonces  $3 \div 4 = 3/4 = 0.75$  no es un entero. Es un tipo de resultado que requiere de la emergencia de un otro concepto mental abstracto: los números fraccionarios, que en conjunto con los naturales forman a los números

racionales  $\mathbb{Q}$ .

Pero la riqueza generada por la división no para ahí. Tenemos por ejemplo la emergencia del concepto abstracto de “singularidad” o “indefinición” si intentamos dividir entre cero. Y la emergencia de otro concepto —especial y muy intrigante— se debe también a la división y consiste en el conjunto de los números primos  $\mathbb{P} = 2, 3, 5, 7, 11, \dots$ , que son aquellos que sólo pueden dividirse por ellos mismos o por la unidad. Volvamos a nuestra planicie africana y pensemos que un padre con 11 frutas que debe dividir las entre sus hijos, nunca tendrá como resultado un número entero, sea cual sea el número de hijos  $< 11$  por el que pretende dividir. Estos números “especiales” eran perfectamente conocidos por nuestros antepasados desde hace por lo menos 20 000 años, según lo muestra el Hueso de Ishango encontrado en el Congo (ver figura 26.1) y que contiene muescas que representan, casi con toda seguridad, mecanismos numéricos que involucran a los números primos [6].



**Figura 26.1:** El hueso de Ishango es un artefacto usado para registros de tipo numéricos pues contiene muescas que en número no son arbitrarias e indican un conocimiento de la división y la multiplicación. Mas aún, todas las muescas que representan números del lado izquierdo del hueso, son los primos comprendidos entre 10 y 20.

Desde aquellos días hasta los nuestros, los humanos se han divertido con la aritmética de las cuatro operaciones básicas sobre el conjunto de los números enteros y la emergencia de conceptos abstractos que surgen en nuestra naturaleza cognitiva. Un juego muy popular en la televisión europea se conoce como “Números y Letras”. Consiste en un grupo de indi-

viduos que concursan entre sí para llegar a un resultado correcto. Quién llegue primero contra reloj es el ganador. A los individuos se les permite el uso de las cuatro operaciones aritméticas (sin uso de calculadoras electrónicas u otros auxilios) y deben alcanzar un número prefijado como resultado de operar mentalmente sobre otro conjunto mínimo de números ofrecidos al azar. Por ejemplo supongamos que se les da el número 24 como número prefijado a alcanzar y se les da el 2, 4 y 8 como números para operarlos. El ganador será quién haga esta operación mental en el tiempo mínimo:  $2 \times (8 + 4) = 24$ . Este juego, aparentemente inocente, implica en su versión generalizada un problema de optimización combinatoria con algoritmos de búsqueda y la emergencia de una transición de fase similar a como ocurre en procesos físicos desordenados [7].

### Lenguajes formales

Supongamos que tenemos un lenguaje formado por dos letras, A y B, y las reglas de interacción (sintaxis) para combinar estas dos letras, son las siguientes [8]:

$$\begin{aligned} A &\longrightarrow B, \\ B &\longrightarrow AB. \end{aligned}$$

Partiendo de una condición inicial que es A, tenemos que la evolución de este sistema (es una gramática; pero puede pensarse en un autómata discreto que realiza operaciones de reproducción y crecimiento) es como se muestra en la figura 26.2.

```
Paso 0: A
Paso 1: B
Paso 2: AB
Paso 3: BAB
Paso 4: ABBAB
Paso 5: BABABBA
Paso 6: ABBABABABBAB
Paso 7: BABABABABBABABBAB
```

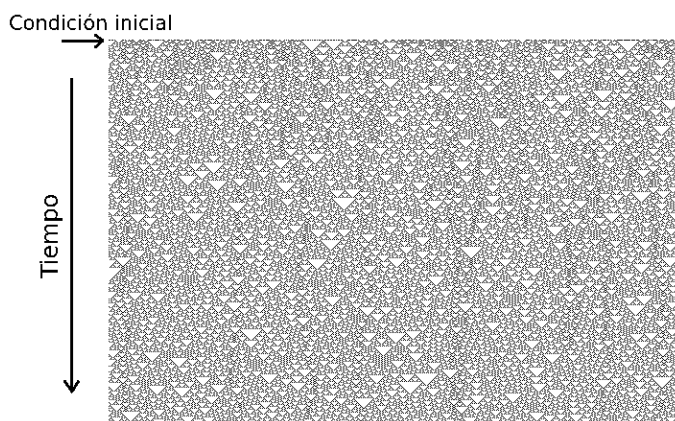
**Figura 26.2:** Evolución temporal del lenguaje formal con la gramática definida por las letras A y B; y una sintaxis donde  $A \longrightarrow B$  y  $B \longrightarrow AB$ , con condición inicial A.

Este sistema sumamente simple, es capaz de exhibir una dinámica no trivial muy peculiar cuando notamos que la suma de las letras a cada paso es 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, . . . y esta es una serie muy conocida en Matemáticas que se llama serie de Fibonacci. La serie de Fibonacci tiene propiedades

geométricas muy particulares y por ello su aparición en la naturaleza es muy recurrente. Aparece, por ejemplo, en los ensambles y disposiciones de las hojas de una planta o en la geometría de una flor. También el cociente límite de términos sucesivos de la serie tiende al número  $1.618\dots$  que es bien conocido como “Proporción Áurea”. Todas esas propiedades de esa sucesión no están especificadas de antemano en las gramática simple que hemos elegido.

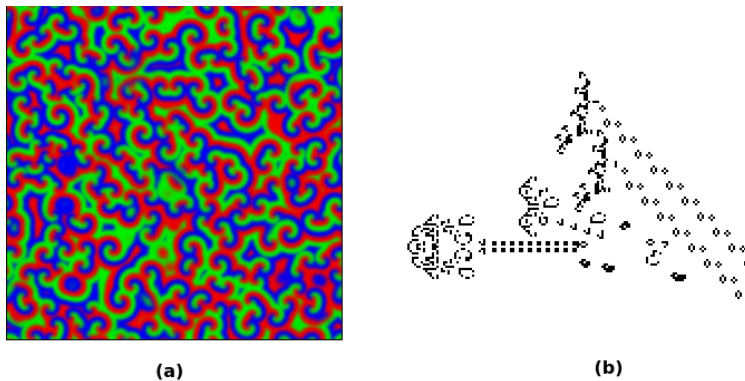
#### Autómatas, patrones espaciales y vida

Los sistemas dinámicos discretos tienen una larga historia en matemáticas. Sin embargo, su exploración más detallada en la actualidad se debe a la invención de las computadoras digitales. Los autómatas celulares son un tipo especial de estos sistemas complejos. En su versión más simple (elemental), son binarios (como el lenguaje formal de arriba), existen en una dimensión y poseen reglas de interacción definidas por el álgebra Booleana [9]. El aspecto más notorio es que tales sistemas producen, a partir de reglas simples locales de interacción y condiciones iniciales desordenadas, patrones globales con un orden emergente autoorganizado. Un ejemplo se muestra en la figura 26.3.



**Figura 26.3:** Evolución temporal de un autómata celular elemental con regla de evolución 18, según la clasificación de Wolfram [9]. Nótese la emergencia de estructuras triangulares que emergen autoorganizadas de un estado inicial desordenado. Este estado inicial es una línea binaria de unos y ceros alternados de manera aleatoria. Luego de un par de iteraciones en la evolución del autómata, se hace evidente la aparición de estructuras que no están codificadas o definidas en el azar inicial.

El universo de posibilidades en un autómata celular es inmenso y apenas explorado. Por ejemplo, una pequeña variante en el tipo de autómata elemental permite encontrar dinámicas que corresponden a puntos fijos, ciclos límite, dinámica caótica ([Capítulo 25](#)) y un cuarto tipo conocido como computadora universal (también llamados clase-IV). Estos sorprendentes autómatas de clase-IV serían, en principio, capaces de simular cualquier proceso en el universo, de ahí su nombre. Podrían entonces simular el universo entero. Esta idea, finalmente, es la motivación que ha llevado al premio Nobel Gerard 't Hooft a proponer que la mecánica cuántica emerge de un universo de autómata celular discreto y determinista [\[5\]](#).



**Figura 26.4:** Evolución temporal de autómatas celulares en dos dimensiones y reglas de evolución locales. (a) Ejemplo de un modelo que simula una reacción química fuera de equilibrio y que resulta en osciladores moleculares no lineales. La escala de colores representan la concentración de uno de los reactivos, rojo es mayor concentración y verde la menor. Este orden es emergente y se aprecia bajo la formación de patrones autoorganizados en forma de frentes de ondas espirales. (b) Un típico atractor biomorfo autoorganizado y estable en el Juego de la Vida [\[10\]](#). En este ejemplo. Los puntos negros son células vivas que forman una estructura coherente que ha surgido de condiciones iniciales aleatorias. De manera genérica se les llama “cañones” pues a cada paso de tiempo “disparan” pequeños conjuntos de células vivas que se propagan diagonalmente.

Los autómatas celulares en dos dimensiones son sistemas complejos con dinámicas que exhiben orden espacio-temporal emergente. Tal como es el caso de aquellos que se usan para simular medios excitables, en particular, las reacciones de tipo Belousov-Zhabotinky [\[11\]](#) (ver figura [26.4](#)). Pero un caso dramático de estos autómatas celulares simples lo constituye el llamado “juego de la vida” y que fue ideado por John Conway en 1970 [\[10\]](#). Se trata de un autómata con las siguientes reglas de evolución: (1) Cualquiera

célula viva con menos de dos células vecinas muere. (2) Cualquier célula con dos o tres células vecinas vive y pasa a la siguiente generación. (3) Cualquier célula con más de tres células vecinas muere, por sobre-población. (4) Cualquier célula muerta con exactamente tres vecinos pasa a estar viva, como si se tratara de una reproducción. El patrón inicial es un patrón aleatorio de unos y ceros en la malla discreta de dos dimensiones. La evolución del sistema puede llevar a formas que crecen, se reproducen y pueden llegar a moverse. Como si se tratara efectivamente de un sistema vivo (figura 26.4).

En síntesis, podemos decir que una frontera nueva de investigación que dominará a la física del siglo XXI, es la física de los sistemas complejos. No se trata del estudio de lo más pequeño o lo más grande, sino de la física de fenómenos que han sido demasiado complejos para tratarse con rigor en épocas pasadas. Los sistemas complejos tienen como ambiciosa misión la exploración de los orígenes de todo y su dinámica, la explicación de la creatividad en la naturaleza para desarrollar estructuras coherentes y funciones, la explicación del origen emergente del universo material y sus leyes y, sobre todo, la emergencia de la materia más compleja conocida en el Universo: la materia viva y sus fenómenos, tales como la inteligencia y las sociedades. Todo ello se pretende estudiar enfatizando el estudio de la termodinámica de sistemas fuera de equilibrio, el estudio de las transiciones de fase, la criticalidad y la autoorganización, el caos y la fractalidad y la emergente ciencia de las redes e interacciones no lineales.

## GLOSARIO

- **Autoorganización:** Emergencia de nuevos ordenes originada en el propio sistema, sin la intervención de agentes externos ni planes prefijados.
- **Complejidad:** Conjunto de propiedades de un sistema complejo, caos, fractales, escalamiento, etc.
- **Emergencia:** Surgimiento de procesos o estructuras nuevas a partir de una acción colectiva.
- **Sistema complejo:** Aquel formado por muchos elementos y donde la interacción no lineal da lugar a procesos autoorganizados. El orden nuevo emergente no puede reducirse a los componentes individuales por separado.



## PARA SABER MÁS:

- Miramontes P., *Río de Tiempo y Agua: Procesos y estructura en la Ciencia de nuestros días*, CopIt ArXives, México. ISBN 978-0-9831172-1-6. libro electrónico en línea, 2010.
- Editado por Octavio Miramontes y Karen Volke, *Fronteras de la física en el siglo XXI*, CopIt ArXives, Mexico. ISBN: 978-1-938128-03-5. libro electrónico en línea, 2013.
- Editado por Mariana Benítez, Octavio Miramontes & Alfonso Valiente-Banuet, *Frontiers in Ecology, Evolution and Complexity*, CopIt ArXives, Mexico. ISBN:978-1-938128-05-9. libro electrónico en línea, 2014.
- Cocho G., *CIENCIA • HUMANISMO • SOCIEDAD*, CopIt ArXives, Mexico. ISBN: 978-1-938128-13-4, libro electrónico en línea, 2017.

## REFERENCIAS

- [1] P. A. R. Ade, N. Aghanim, M. Arnaud y col., «Planck 2015 results - XIII. Cosmological parameters», *Astronomy & Astrophysics*, vol. 594, A13, oct. de 2016.
- [2] E. P. Tryon, «Is the Universe a Vacuum Fluctuation?», *Nature*, vol. 246, n.º 5433, págs. 396-397, dic. de 1973.
- [3] L. de la Peña, A. Valdés-Hernández y A. M. Cetto, «Quantum Mechanics as an Emergent Property of Ergodic Systems Embedded in the Zero-point Radiation Field», *Foundations of Physics*, vol. 39, n.º 11, pág. 1240, sep. de 2009.
- [4] G. 't Hooft, «Emergent Quantum Mechanics and Emergent Symmetries», *AIP Conference Proceedings*, vol. 957, n.º 1, págs. 154-163, nov. de 2007.
- [5] ———, *The Cellular Automaton Interpretation of Quantum Mechanics*, ép. Fundamental Theories of Physics. Springer International Publishing, 2016.
- [6] J. de Heinzelin, «Ishango», *Scientific American*, vol. 206, págs. 105-116, jun. de 1962.
- [7] L. Lacasa y B. Luque, «Phase transition in the countdown problem», *Physical Review E*, vol. 86, n.º 1, pág. 010 105, jul. de 2012.

- [8] T. R. J. Bossomaier y D. G. Green, eds., *Complex Systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [9] S. Wolfram, «Universality and complexity in cellular automata», en, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 10, n.º 1, págs. 1-35, ene. de 1984. (visitado 13-03-2020).
- [10] M. Gardner, «Mathematical Games: The fantastic combinations of John Conway's new solitaire game life», *Scientific American*, vol. 223, n.º 4, págs. 120-123, 1970.
- [11] M. Markus y B. Hess, «Isotropic cellular automaton for modelling excitable media», *Nature*, vol. 347, n.º 6288, págs. 56-58, sep. de 1990. (visitado 13-03-2020).

## LA FÍSICA EN LA BIOLOGÍA

*Rafael Ángel Barrio Paredes\**

**En tiempos recientes ha habido una interrelación cada vez más fuerte entre la Física y la Biología, principalmente porque ésta última ha avanzado enormemente como ciencia y también los físicos se han dado cuenta que son capaces de abordar sistemas biológicos complejos con conceptos elementales en Física. Ambas disciplinas se benefician tanto con esta interacción, a tal punto que los límites interdisciplinarios se borran gradualmente, dando lugar a una ciencia nueva. En este espacio abordaré los aspectos principales de este fenómeno y daré ejemplos de los beneficios cuando existe Física en la Biología**

La Física es considerada universalmente como la ciencia mas desarrollada y exitosa. Esto se debe probablemente a dos razones, primeramente la Física se ocupa de problemas simples; y en segundo lugar, se enfoca a investigar sólo aspectos universales de los sistemas, a un nivel de descripción que no toma en cuenta todos los detalles que pueden ser incluidos como parámetros. Por el contrario, la Biología tradicionalmente se ocupa de describir sistemas espeluznantemente complicados en los cuales siempre hay excepciones a la regla. Otro aspecto en el contrastan las dos disciplinas es que la Física usa la matemática como el principal medio de expresión, mientras que la Biología muy rara vez usa conceptos matemáticos complicados.

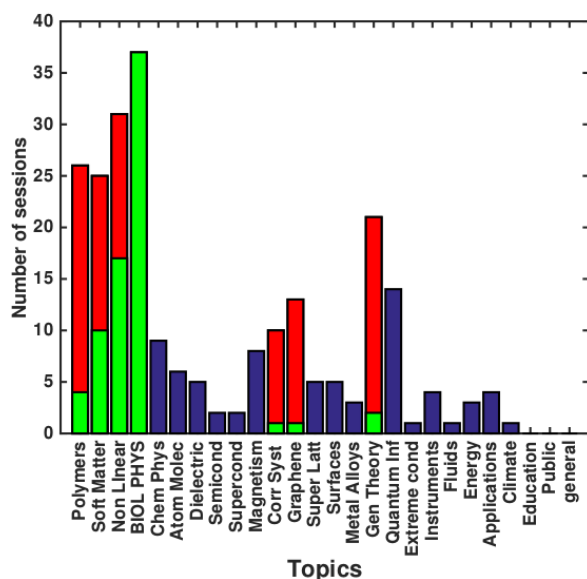
Es interesante apuntar que, muy curiosamente, algunos grandes adelantos científicos que han impactado en forma brutal en nuestra vida cotidiana, social y económicamente, se dieron en la Física y la Biología simultáneamente. En el siglo XVIII Galvani (biólogo y físico descubridor de la electricidad en los animales, o bioelectromagnetismo) y Newton (la Teoría de la Gravitación universal, la óptica y las leyes de movimiento), en el siglo XIX

---

\*Departamento de Sistemas Complejos, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

Darwin (la Teoría de la evolución) y Maxwell (Teoría del electromagnetismo), a principios del siglo XX Ramón y Cajal (descubridor de la neurona) y Einstein (el físico mejor conocido por sus trabajos revolucionarios y fundamentales), en los años cincuenta Bardeen (inventor del transistor y la teoría de la superconductividad) y Watson, Crick (descubridores de la estructura del ADN), y muchos otros ejemplos.

Sin embargo, la aportación del conocimiento científico entre las dos disciplinas ha sido asimétrico. La Biología se ha alimentado abundantemente de los adelantos en la Física, mientras que la Física ha ignorado frecuentemente los avances en el conocimiento de los fenómenos biológicos, ya sea por ignorancia o por miedo.



**Figura 27.1:** Número de sesiones en el “APS March Meeting 2018” por disciplina de Física. En rojo se muestran las sesiones en que existen trabajos relacionados con Biología y en verde la proporción de sesiones enteramente dedicadas a problemas biológicos, datos tomados de [1].

Pero esto está cambiando recientemente. Cada vez más físicos se adentran en sistemas y problemas biológicos complicados. En la reunión de la American Physical Society (APS) en marzo del 2018, el número de trabajos registrados fue de 1673, de los cuales 860 están inspirados en temas biológicos, desde la biología molecular, medicina, botánica, hasta procesos cerebrales y ecología. Es decir, el 51% de los trabajos toman aspectos tra-

dicionalmente reservados a los biólogos. En la figura 27.1 muestro el plan de sesiones de dicha reunión por disciplinas. El 37% de las sesiones están dedicadas enteramente a problemas biológicos y se presentan en 7 tópicos diferentes de la Física. Esta evidencia muestra que una proporción importante de físicos está involucrado.

Esto rara vez había ocurrido antes debido a que los procesos físicos en los organismos vivos son considerados como los más complejos niveles de organización de muchos cuerpos a nivel atómico o molecular, donde las interacciones elementales (nucleares o electromagnéticas), que ciertamente suceden en estos sistemas, se enmascaran en una serie de comportamientos colectivos que producen propiedades emergentes, que son las importantes en la escala espacio-temporal de la maquinaria biológica. Ahora examinaremos de qué forma se ha dado esta interacción reciente.

#### ASPECTOS DE LA FÍSICA EN LA BIOLOGÍA

Indudablemente, la Física ha impactado en los estudios biológicos en cuatro aspectos diferentes: La instrumentación experimental, la automatización en la adquisición e interpretación de datos, la fenomenología y la introducción de modelos matemáticos.

Los aportes en la instrumentación son tan vastos que no tengo el espacio siquiera para enumerarlos, ya no digamos describirlos: Los rayos X, semiconductores, algoritmos computacionales y de visualización, sensores de silicio, resonancia magnética, emisión de positrones, "patch clamp" (técnica de fijación de membranas para electrofisiología de una sola célula), fluorescencia, microscopía electrónica, microscopía de dos fotones, microscopía confocal, elementos radioactivos, manipulación genética, etc.

Los avances en los algoritmos para procesar bancos de datos enormes ahora se combinan para obtener datos biométricos que ayudan en la investigación tanto de procesos sociales, ecológicos y de comportamiento como de procesos cerebrales tan complicados como las emociones, la toma de decisiones y la conciencia [2]. Éste es un aspecto muy importante, pero actualmente no ligado únicamente con la Física, por lo que lo dejaré sin discutir y me enfocaré en los otros aspectos restantes. Es necesario decir que actualmente no existen teorías matemáticas formales en Biología, algo así como la ecuación de Schrödinger de los sistemas vivos, ni desde el punto de vista de la Física ni de la Biología. La famosa Teoría de la Evolución espera un desarrollo formal matemático riguroso.

## FENOMENOLOGÍA Y MODELOS MATEMÁTICOS

Según el diccionario de la Real Academia de la Lengua, fenomenología es 1) *Teoría de los fenómenos o de lo que aparece*, o bien 2) *Dialéctica interna del espíritu que desde el conocimiento sensible a través de las distintas formas de consciencia llega hasta el saber absoluto*. Ninguna de las definiciones es apropiada en este contexto, como siempre el diccionario de Oxford tiene una definición mejor: *The science of phenomena as distinct from that of the nature of being*<sup>1</sup>. En efecto, ya sabemos que los procesos biológicos son a final de cuentas físicos, cuyos efectos se miden a cierta escala. En las escalas biológicas los procesos físicos fundamentales dan lugar a fenómenos colectivos y complejos, que tienen forzosamente que ser descritos fenomenológicamente. Podríamos decir que la fenomenología unida a la modelación matemática substituyen satisfactoriamente a la promulgación de una teoría universal de primeros principios.

Es en este ámbito que la colaboración entre físicos y biólogos se vuelve extremadamente fructífera e importante. A continuación daré solamente dos ejemplos de este tipo de investigación científica.

## Morfogénesis

Uno de los primeros que relacionó los patrones espaciales en sistemas biológicos con un fenómeno de auto organización, fue el naturalista D'Arcy Thompson [3]. Las conexiones que él hizo entre la biología y otros campos del conocimiento científico, en su importante libro de 1917, inspiraron muchos trabajos posteriores, tanto experimentales como teóricos.

La formación de patrones espaciales, o de una "forma" en general, resulta de un rompimiento de simetría. Es decir, a partir de un sistema simétrico y uniforme se generan regiones distinguibles del espacio. Esto sería algo así como "antidifusión". Sin embargo, Alan Turing mostró en 1952 que en un sistema de dos sustancias, que se difunden en un medio y reaccionan entre sí, se puede formar un patrón espacial estacionario, algo totalmente contraintuitivo. En el resumen de su importante artículo [4] escribe:

*"The purpose of this paper is to discuss a possible mechanism by which the genes of a zygote may determine the anatomic structure of the resultant organism. The theory does not make any new hypothesis, but merely suggests that certain*

---

<sup>1</sup>La ciencia de los fenómenos, que se distingue de la ciencia de la naturaleza de ser.

*well known physical laws suffice for explaining many facts.*"<sup>2</sup>

En ese mismo artículo Turing acuñó la palabra morfogénesis para el conjunto de procesos que llevan a un sistema a tomar una forma precisa, y en consecuencia las sustancias responsables de esto se conocen como morfógenos. Los patrones aparecen cuando un estado estacionario estable y uniforme en ausencia de difusión, se vuelve inestable bajo la presencia de ésta, debido a que compete con las interacciones no lineales que surgen de la cinética de reacción. Este fenómeno se conoce ahora como la inestabilidad de Turing, o "diffusion driven instability".

Los modelos de Turing pertenecen a una familia de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales no lineales que se conocen como sistemas de *reacción-difusión*. Estos sistemas pueden presentar una inestabilidad de Turing si, y sólo si, se dan ciertas condiciones restrictivas. Los sistemas de reacción-difusión presentan una amplia variedad de comportamientos, usualmente pensados para modelar fenómenos específicos. Sin embargo todos presentan características universales que pueden ser fácilmente mostradas por un sistema general de Turing. En 1999 nuestro grupo propuso ese modelo general, conocido como el modelo BVAM [5], que se obtiene al suponer que existe un punto fijo de equilibrio alrededor del cual se hace un desarrollo de Taylor hasta tercer orden, exigiendo la conservación de la masa. El resultado es

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\nabla^2 u + \eta (u + av - cuv - uv^2), \quad (27.1a)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \nabla^2 v + \eta (bv + hu + cuv + uv^2). \quad (27.1b)$$

Donde  $D$  es la razón de los coeficientes de difusión, los coeficientes  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $h$  aparecen así por la ley de conservación y  $\eta$  es un parámetro de escala. El análisis lineal de estas ecuaciones se detalla en la referencia [6].

Este modelo surgió porque en 1995 apareció un artículo [7] en el cual se sostenía que el patrón de pigmentación característico de la piel de algunas especies de peces marinos de la familia *Pomacanthus* (peces ángel) representaba la primera realización de la inestabilidad de Turing en un ser vivo. Pero los cálculos fueron hechos en una dimensión, lo cual es erróneo. Dichos peces presentan un patrón de rayas semicirculares cuando son jóvenes. Este patrón es común a todas las especies de la misma familia de peces ángel, lo

<sup>2</sup>El propósito de este artículo es discutir un posible mecanismo por el cual los genes de un cigoto pueden determinar la estructura anatómica del organismo resultante. La teoría no hace ninguna nueva hipótesis, sino que meramente sugiere que leyes de la física bien conocidas bastan para explicar muchos hechos.

cual muy probablemente tiene que ver con la prevención del canibalismo selectivo de parte de los adultos. Cuando llegan a la fase adulta, el diseño cambia dramáticamente al patrón característico de cada especie.



**Figura 27.2:** Transición de la piel del *Pomacanthus imperator* de infante (izquierda) a adulto (derecha).

En nuestro estudio se hicieron numerosos cálculos numéricos en dos dimensiones, usando el modelo BVAM, para obtener el patrón de pigmentación típico del *Pomacanthus imperator* durante su crecimiento y se compararon los resultados con observaciones experimentales.

En la figura 27.2 mostramos la transición de nuestro pez de joven a adulto, lo que corrobora sin lugar dudas que un mecanismo de Turing está presente en esta especie, pues la forma en que se conserva la longitud de onda mientras el animal crece es por bifurcación e inserción de líneas, tal como lo predice el modelo<sup>3</sup>.

Para poder obtener patrones alineados horizontalmente con el modelo BVAM, sugerimos la existencia de fuentes de morfógenos en la espina dor-

<sup>3</sup>Nuestro pez estuvo cuatro años sin crecer. Estos peces dejan de crecer si el ambiente en el que se encuentra no tiene suficiente espacio, los cambios en el patrón comenzaron a ocurrir rápidamente, en cuestión de semanas, cuando lo trasladamos a un tanque enorme.



sal del pez, lo cual fue posteriormente corroborado experimentalmente. En este trabajo, también propusimos que la modulación del coeficiente de difusión en algunas direcciones podría producir un patrón alternado de puntos y rayas, característico de otras especies de peces. Patrones más complicados se han modelado mediante el acoplamiento (lineal o no lineal) de dos o más sistemas de Turing. También el modelo BVAM ha sido aplicado a otros sistemas, como los patrones de puntos en diferentes especies de mariposas (familia *Coccinellidae*), y la morfogénesis de las alas de las mariposas.

### El experimento de Faraday y la Evolución

En 1831 Faraday agitó vertical y periódicamente un vaso con agua y observó que la superficie adquiría una forma regular, si la perturbación era pequeña, se formaban círculos concéntricos, pero si se aumentaba la perturbación, se formaban patrones con una cierta simetría. Entonces, de una forma por demás lúcida y profética, escribió en unas observaciones depositadas en la Royal Society el 12 de marzo de 1832:

*"I am inclined to compare the diffusion of magnetic forces from a magnetic pole to the vibrations upon the surface of disturbed water, or those of air in the phenomenon of sound, i.e. I am inclined to think the vibratory theory will apply to these phenomena as it does to sound, and most probably light."*<sup>4</sup>

Este famoso experimento de Faraday fue explicado por Lord Rayleigh teóricamente, y los círculos son las funciones de Bessel, soluciones del problema lineal en simetría cilíndrica. En el régimen no lineal, los patrones que se forman no pueden ser predichos por la teoría de Rayleigh.

Nosotros repetimos el experimento de Faraday en 1995 usando un líquido que propiciara el régimen no lineal, y obtuvimos patrones con diferentes simetrías variando la amplitud y la frecuencia de las oscilaciones (parámetro de bifurcación), manteniendo la altura del agua en el vaso constante. Desarrollamos un tratamiento teórico basados en la ecuación de Navier-Stokes, haciendo la aproximación de columna y agregamos un término no lineal que toma en cuenta el acoplamiento del campo vertical de velocidades con el horizontal en el fondo del contenedor, el resultado es,

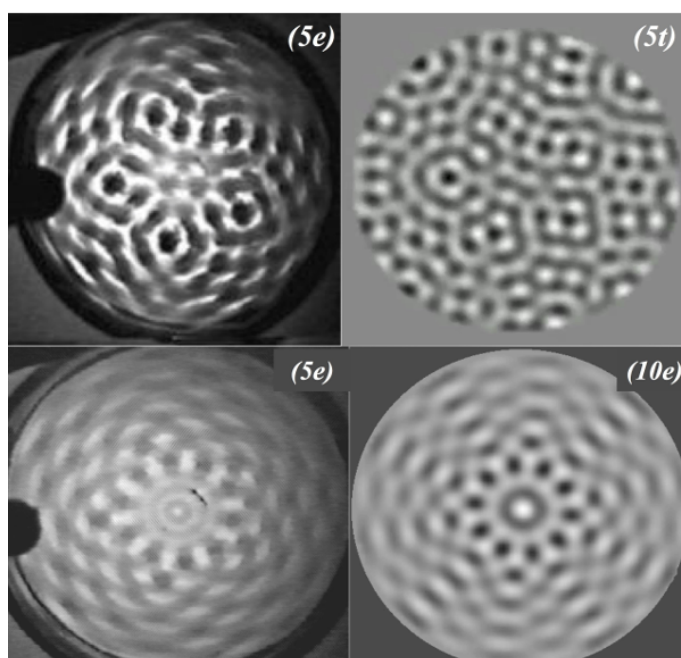
---

<sup>4</sup>Me inclino a comparar la difusión de fuerzas magnéticas desde un polo magnético a las vibraciones sobre la superficie de agua perturbada, o aquellas del aire en el fenómeno del sonido, es decir, me inclino a pensar que la teoría vibratoria se aplicara a estos fenómenos como se aplica al sonido, y muy probablemente a la luz.

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = gh_o \left( 1 - \frac{A}{h_0} \sin(\omega t) \right) \nabla^2 \phi - \frac{\sigma' h_0}{\rho} \nabla^4 \phi + \gamma \nabla^2 \frac{\partial \phi}{\partial t} - C\omega \cos(\omega t) \sin(q\phi), \quad (27.2)$$

donde  $\phi$  es la función potencial del campo de velocidades ( $\vec{v} = -\nabla\phi$ ),  $\sigma' = \sigma = gh_0^2/3$  es un coeficiente efectivo de tensión superficial,  $\gamma$  es la viscosidad,  $g$  la constante de gravedad,  $h_0$ ,  $A$  y  $\omega$  son la altura del líquido, la amplitud y frecuencia de vibración, respectivamente. Las constantes  $C$  y  $q$  regulan la intensidad del acoplamiento.

En la figura 27.3 muestro un ejemplo de los patrones no lineales obtenidos en el experimento comparados con los patrones que se obtienen de resolver la ecuación (27.2).

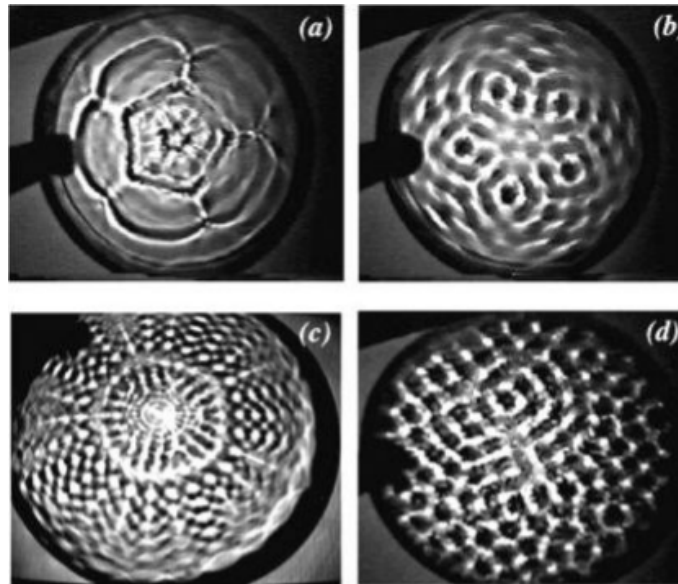


**Figura 27.3:** En la columna de la izquierda se muestran fotografías del experimento de Faraday, y en la derecha están los correspondientes patrones teóricos con simetrías 5 y 10.

Se observa que el modelo arroja resultados muy parecidos al experimento. Una observación importante es que el modelo carece de parámetros

ajustables, con excepción de la intensidad de la interacción no lineal, que se mantiene fija. Por tanto, me inclino a creer que la ecuación (27.2) es una teoría en toda regla y no un modelo teórico.

Pero, ¿que tiene que ver todo esto con la Biología?. Resulta que si se sigue el árbol de bifurcaciones con simetría 5, los patrones que se obtienen corresponden a la forma de las conchas de los erizos marinos en consecutivos tiempos geológicos. Esto se menciona en la referencia [8] y es el punto importante. Este resultado se muestra en la figura 27.4 y demuestra que la evolución de la forma de los seres vivos no solo obedece a la selección natural y la adaptación de las especies, ni es fortuita o casual, sino que corresponde a un proceso en que también intervienen las leyes de la Física. Nos resta averiguar la conexión real entre las dos teorías, o incorporar los procesos físicos dentro de la teoría de la evolución.



**Figura 27.4:** Patrones obtenidos en el experimento de Faraday siguiendo bifurcaciones consecutivas de simetría 5.

## EPÍLOGO

La lección que debemos recordar es que aún los procesos más complicados en los seres vivos se originan de interacciones simples puramente descritas por la Física más elemental, y que la investigación en Biología se

ve enormemente reforzada si se incluyen los modelos matemáticos basados en leyes y conceptos físicos. Esta lección y la han aprendido un número importante de físicos y un número cada vez mas grande de biólogos.

## REFERENCIAS

- [1] «APS -APS March Meeting 2018», en *Bulletin of the American Physical Society*, vol. Volume 63, Number 1, American Physical Society, feb. de 2020. dirección: <https://meetings.aps.org/Meeting/MAR18/Content/3475> (visitado 20-02-2020).
- [2] Y. N. Harari, *Homo Deus: A brief history of tomorrow*. London: Harvill Secker, 2016.
- [3] D. W. Thompson, *On growth and form*. Cambridge: Cambridge University Press, 1961.
- [4] A. M. Turing, «The chemical basis of morphogenesis», *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences*, vol. 237, n.º 641, págs. 37-72, ago. de 1952.
- [5] R. A. Barrio, C. Varea, J. L. Aragón y P. K. Maini, «A two-dimensional numerical study of spatial pattern formation in interacting Turing systems», *Bulletin of Mathematical Biology*, vol. 61, n.º 3, págs. 483-505, mayo de 1999.
- [6] J. D. Murray, *Mathematical Biology*, en, ép. Biomathematics. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1989, vol. 19.
- [7] S. Kondo y R. Asai, «A reaction–diffusion wave on the skin of the marine angelfish *Pomacanthus*», *Nature*, vol. 376, n.º 6543, págs. 765-768, ago. de 1995.
- [8] R. A. Barrio, J. L. Aragón, C. Varea y col., «Robust symmetric patterns in the Faraday experiment», *Physical Review E*, vol. 56, n.º 4, págs. 4222-4230, oct. de 1997.

VI

MECÁNICA CUÁNTICA



## LAS PARTÍCULAS TAMBIÉN SE DIFRACTAN

*Ana María Cetto\**

La descripción del comportamiento de objetos a escala cuántica requiere de dos conceptos físicos aparentemente antagónicos: onda y partícula. Si bien la mecánica cuántica ha tenido un impresionante desarrollo durante los cien años que lleva de vida, no deja de sorprender el hecho de que las partículas exhiban fenómenos como difracción e interferencia, independientemente de sus propiedades localizadas como carga eléctrica o masa. La observación de fenómenos ondulatorios en sistemas constituidos por lo que tradicionalmente llamamos partículas, a nivel atómico y a nivel macroscópico, permite establecer puentes de conexión entre lo clásico y lo cuántico, a la vez que aclara el sentido de la coexistencia de los conceptos involucrados. Más importante aún, su estudio nos puede ayudar a entender el origen y la naturaleza del fenómeno ondulatorio característico de sistemas cuánticos.

## INTRODUCCIÓN: UN POCO DE HISTORIA

A lo largo del siglo XIX fueron tomando forma dos concepciones opuestas acerca de la estructura de la materia. Por una parte tenemos los notables estudios estequiométricos de Lavoisier que condujeron, con base en la ley de conservación de la masa, a la demostración por Proust de que en una reacción química los componentes siempre se combinan en proporciones definidas. De estos importantes resultados, Dalton concluyó que los elementos químicos de los que está compuesta toda la materia son indivisibles, y que todos los átomos de un elemento dado son idénticos (ver [Capítulo 39](#)). La teoría atómica deja, con ello, de ser una simple especulación atribuida a Leucipio y Demócrito veintitrés siglos atrás, para comenzar a establecerse científicamente.

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

Para la física, sin embargo, el siglo XIX fue claramente el siglo de la continuidad en la Naturaleza, comenzando con los no menos notables experimentos de interferencia realizados por Young que demostraban el carácter ondulatorio de la luz, aparentemente dando con ello el triunfo a Hooke y Huygens sobre Newton. La introducción del concepto de campo y el desarrollo de la teoría electromagnética hasta culminar con las ecuaciones de Maxwell, reafirmaban esta noción de continuidad. Aun cuando, con el descubrimiento del electrón como partícula con carga y masa, la electricidad dejó de ser entendida como un fluido, predominaba el modelo de la materia como compuesta de una masa informe y continua —si bien salpicada de electrones como pasitas en una hogaza de pan—. Ni las contribuciones seminales de Maxwell y Boltzmann a la teoría cinética de los gases habían logrado convencer a los físicos de la realidad de los átomos y moléculas.

No es difícil apreciar que, dado el ambiente que reinaba entre los físicos en el umbral del siglo XX, el mismo Planck tuviera serias dudas de que su descubrimiento de los cuantos de energía de radiación intercambiados por las paredes de una cavidad térmica, fuera correcto. Sin embargo, el excelente ajuste con los datos experimentales de su fórmula para la distribución espectral de la radiación, aunado a su poder de predicción más allá de lo que los detectores de la época habían logrado registrar, hacía irresistible su publicación. Con el empleo que hace Einstein de la hipótesis de Planck para explicar el efecto fotoeléctrico, queda establecida años más tarde la existencia de los cuantos de radiación. Los trabajos subsecuentes del propio Einstein y otros le dan carta de identidad al fotón como una de las piedras angulares de la física moderna. ¡Pero no por ello deja de ser cierta la teoría de Maxwell que establece la radiación como un fenómeno ondulatorio!

De ser así, arguye de Broglie en su trabajo doctoral de 1924, también las partículas con masa deben tener propiedades ondulatorias. Dicho y hecho, su célebre fórmula que relaciona la longitud de onda con el inverso de la cantidad de movimiento de la partícula, es comprobada experimentalmente una y otra vez. Empezando por Davisson y Germer, que encuentran en ella la explicación del patrón de máximos y mínimos obtenidos al irradiar con un haz de electrones un trozo de níquel accidentalmente cristalizado: ¡los electrones se difractan de los planos del cristal, de la misma manera como se difracta la luz, dando lugar a interferencia constructiva y destructiva!

Con el empleo de haces de electrones, neutrones y otras partículas pequeñas, las técnicas de difracción, que habían nacido con los rayos X, se desarrollaron hasta convertir la cristalografía en una importante ciencia experimental. Gracias a ella se conocen las estructuras de una variedad de



cristales y de macromoléculas de importancia biológica, como proteínas, vitaminas, el ARN y el ADN, inclusive partículas de virus. Cabe agregar que el cálculo de la 'óptica' del microscopio electrónico de transmisión (el símil electrónico del microscopio compuesto óptico) se basa en la consideración de las propiedades ondulatorias del haz de electrones.

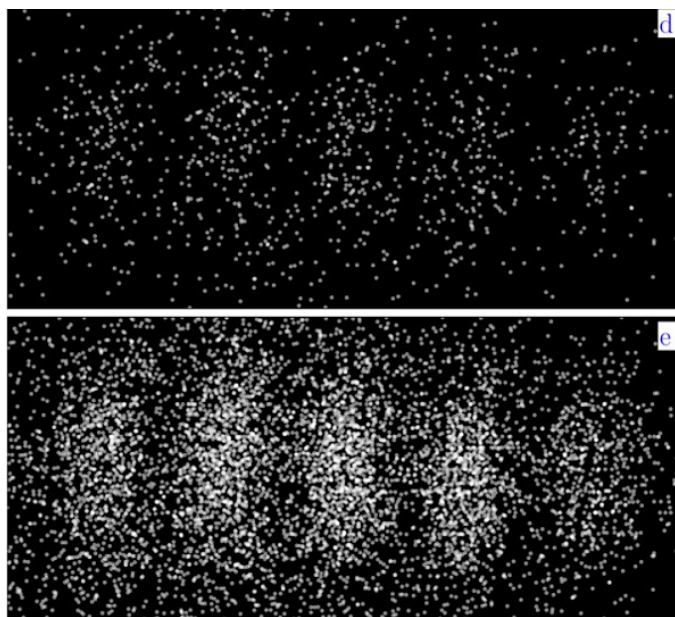
#### LA MECÁNICA ONDULATORIA DE LAS PARTÍCULAS

Las investigaciones de de Broglie lo condujeron a formular la hipótesis de que *cualquier* partícula en movimiento lleva asociada una onda. De ahí nace un nuevo campo en la física: la mecánica ondulatoria, que amalgama de manera singular elementos de la física de ondas y de la física de partículas —dos ramas de la física que tradicionalmente no se hablan mucho—. De Broglie emplea ingeniosamente la teoría de la relatividad especial para establecer los puentes necesarios. Así, por ejemplo, a la ecuación que relaciona la energía y la frecuencia de la luz:  $E = h\nu$ , hace corresponder la ecuación que relaciona la cantidad de movimiento y el número de onda de la partícula:  $p = h\mathbf{k}$  —los tres componentes restantes del cuadrivector—. El comportamiento ondulatorio de las partículas y el modelo de onda piloto de de Broglie dieron pie para la búsqueda de una ecuación de onda que describiera la dinámica de la partícula; este es el gran paso que dio Schrödinger en 1926. Curiosamente, sin embargo, el éxito de la ecuación de Schrödinger significó el abandono de la onda guía de de Broglie a favor del formalismo cuántico.

¿Cuál es la naturaleza de la onda piloto? ¿Qué representa la solución de la ecuación de Schrödinger, se trata de una onda física, material? ¿Está asociada a un campo, es sólo una onda de probabilidad, o bien meramente una herramienta matemática? Al pasar un haz de electrones por una doble rendija, ¿las partículas pasan por las dos al mismo tiempo, por una o por la otra, o por ninguna de las dos? ¿El patrón de interferencia significa que las partículas interfieren consigo mismas? ¿Cómo podría entenderse entonces la difracción de partículas por un cristal que tiene del orden de  $10^{14}$  átomos (o moléculas) por  $\text{cm}^2$  de superficie?

Si el lector siente que no puede responder a tales preguntas, sepa que no está solo. Cuestiones como éstas fueron abordadas por los principales fundadores de la mecánica cuántica en el histórico 5° Congreso de Solvay, en 1927. En medio de intensos debates desde posiciones encontradas, se hicieron palpables la confusión y la falta de consenso sobre el significado físico del formalismo cuántico que en aquella época estaba en sus albores. Hoy, la

situación no es muy diferente, como se puede constatar con una ojeada a la bibliografía, comenzando por los libros de texto y materiales de apoyo para cursos de mecánica cuántica. Para muestra basta un botón: es usual leer en los textos (y escuchar en los cursos en línea) que en el proceso de difracción de electrones éstos sufren una especie de metamorfosis de ida y vuelta: primero actúan como partículas al ser acelerados por el voltaje aplicado al cañón electrónico; en seguida actúan como ondas al ser difractados por el cristal, y al final actúan nuevamente como partículas al incidir sobre la pantalla de fósforo. La ‘dualidad partícula-onda’ se entiende entonces como la capacidad del electrón de portarse alternadamente como onda y como partícula, dependiendo de las condiciones específicas del experimento.



**Figura 28.1:** Un haz de electrones lanzado con velocidad  $v$  hacia una pantalla con dos rendijas, forma un patrón de máximos y mínimos que cumple con las leyes de la difracción, con la longitud de onda asociado al haz dado por la fórmula de de Broglie:  $\lambda = h/mv$ . Los puntos en la figura indican los lugares donde los electrones impactan, uno a uno, la pantalla detectora. La constante de periodicidad del cristal debe ser del orden de  $\lambda$  para que el patrón sea apreciable. (Tomado de [1], cortesía de Herman Batelaan).

El caso es que, como se muestra en la figura 28.1, cuando un haz electrónico de baja intensidad es lanzado hacia un cristal o una pantalla opaca con dos rendijas, puede observarse que los electrones impactan en el detector

uno a uno, formándose gradualmente un patrón de máximos y mínimos que cumple con las leyes de la difracción [1].

#### LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER. ¿QUÉ NOS DICE LA FUNCIÓN DE ONDA?

Los que estamos familiarizados con la mecánica cuántica nos hemos acostumbrado a aceptar varios de sus elementos centrales como postulados —si bien ya al nivel de la teoría cuántica de campos—, algunos de ellos se derivan del formalismo. Así, por ejemplo, la existencia del espín y el principio de Pauli son postulados. La misma ecuación de Schrödinger es, en sentido estricto, una ecuación postulada, lo cual contribuye naturalmente a la falta de claridad sobre su significado físico. Si bien suele llamársele ecuación de onda, tampoco lo es en el sentido estricto del término; las ondas (por ejemplo las sonoras, las de una cuerda o de un fluido, o las del campo de radiación electromagnética) satisfacen ecuaciones parciales de segundo orden. La solución,  $\Psi$ , tampoco representa una onda física (si bien dentro de la teoría de Bohm llega a asociársele dos campos, uno a la parte real y otro a la imaginaria de  $\Psi$ , pero sin que se especifique la naturaleza física de los mismos).

Lo que sí podemos afirmar con certeza, es que  $\Psi$  se refiere a un fenómeno de características ondulatorias asociado a la dinámica de las partículas; que el módulo de  $\Psi$  al cuadrado es proporcional a la densidad de probabilidad, y que el gradiente de la fase de  $\Psi$ , multiplicado por el módulo de  $\Psi$  al cuadrado, está asociado a la densidad de corriente. La densidad de probabilidad y la densidad de corriente son conceptos estadísticos, de manera que la descripción proporcionada por la ecuación de Schrödinger debe entenderse con un sentido estadístico. Adicionalmente, la linealidad de la ecuación, combinada con su carácter complejo, admite la aparición de fenómenos de interferencia: se suman amplitudes, no densidades. Se pueden combinar en una expresión funciones de estado de dos o más partículas, dando lugar a entrelazamiento.

No deja de sorprender el comportamiento predicho por la ecuación de Schrödinger para problemas específicos. Recordemos algunos ejemplos sencillos: en el efecto túnel pueden atravesar algunas partículas la barrera de potencial  $V$  aun cuando llevan una energía “clásicamente insuficiente” ( $E < V$ ). Dentro de la barrera hay una densidad de probabilidad diferente de cero y exponencialmente decreciente, a la manera de las ondas evanescentes que pueden ocurrir cuando la luz o el sonido pasa de un medio a otro de

diferente densidad. Tenemos también que un haz de partículas lanzado hacia un escalón de potencial  $V$ , con  $E > V$ , sufre reflexión parcial a pesar de llevar energía suficiente para continuar su camino. Y cuando las partículas son lanzadas hacia una barrera de potencial de longitud finita, con energía suficiente para atravesarla, hay transmisión total sólo para determinados valores de la energía, dando lugar a lo que se conoce como transmisión resonante. Ni hablar del patrón de interferencia que se forma al lanzar un haz “monocromático” de partículas (todas con la misma velocidad) hacia un obstáculo con dos rendijas en su camino a la pantalla de detección, como mencionamos arriba (figura 28.1). No es casual que Richard Feynman, en su célebre curso de mecánica cuántica [2], afirmara que “nadie entiende la mecánica cuántica” y que el experimento de la doble rendija contiene “su único misterio”.

De los ejemplos recién mencionados y de muchos otros que se presentan en los textos de mecánica cuántica, el lector puede apreciar que el lenguaje ondulatorio permea la descripción de la dinámica de las partículas. Es inevitable la mención de conceptos como longitud de onda (de de Broglie), número de onda, reflexión parcial, difracción e interferencia. Asociada a este elemento ondulatorio se presenta en la descripción de los sistemas cuánticos otra característica peculiar: la no localidad. La función  $\Psi$  es una función extendida en el espacio y, como tal, contiene información sobre el entorno. Por ejemplo, en el clásico problema de la partícula en el pozo, basta con desplazar una de las paredes para que se altere  $\Psi$  en todo el interior del pozo; este es claramente un efecto no local. Otro ejemplo más dramático es el de dos partículas iguales que no interactúan directamente: si forman parte del mismo sistema, el estado conjunto es un estado enredado, lo que significa que se establecen correlaciones entre las variables dinámicas de las dos partículas. Cuando, además, se trata de dos fermiones (por ejemplo, electrones), resulta que la función de onda conjunta es antisimétrica y los electrones no pueden ocupar el mismo estado individual, de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli. Este efecto sobre el par de partículas no depende de la distancia entre ellas: la no localidad opera mientras las dos formen parte del mismo sistema.

¿Acaso tiene que ver esta interacción indirecta entre los electrones —esta aparente “acción a distancia”— con su naturaleza ondulatoria? Pensemos en un sencillo análogo clásico, por ejemplo un sistema formado por dos barcos de juguete que navegan uno cerca del otro en un estanque con agua. Por medio de las ondas que genera en la superficie al desplazarse, cada uno de los barcos se entera de la presencia del otro, sin necesidad de tocarse o

de mandarse señales. Pero nótese que con este ejemplo hemos introducido un ingrediente ajeno al pensamiento convencional asociado a la mecánica cuántica: los barcos (nuestras “partículas”) en ningún momento se transforman en ondas, simplemente se mueven en un medio ondulatorio, capaz de correlacionar sus movimientos. No hay acción a distancia; el efecto no local es sólo aparente.

¿Acaso puede encontrarse una explicación similar para el fenómeno partícula-onda en la mecánica cuántica?

#### UN CAMPO SUBYACENTE

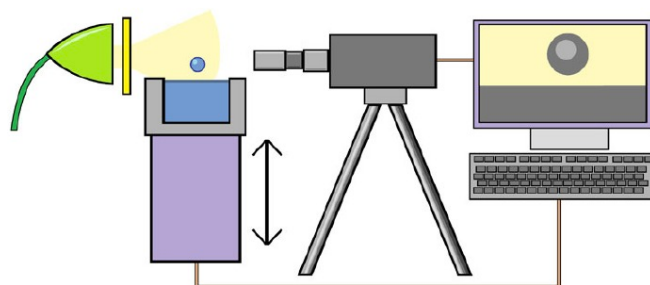
En 1911, diez años después de la publicación del trabajo que lo hizo famoso, Max Planck publicó una nueva versión de su fórmula para la distribución espectral de la radiación térmica, que difiere de la primera sólo por un término adicional. Este término tiene la característica de subsistir aun a temperatura cero; en otras palabras, representa una radiación remanente, atérmica, que permea todo el espacio. Se trata de un campo fluctuante, de energía constante e igual a  $\frac{1}{2}h\omega$  por modo normal de oscilación. La electrodinámica cuántica retoma esta idea de las “fluctuaciones del vacío” de manera formal; para Planck, en cambio, se trata de un campo real, maxwelliano, cuyos efectos, por lo tanto, también deben ser reales.

Durante el desarrollo de la teoría cuántica se le prestó escasa atención a este campo; si acaso aparece mencionado circunstancialmente en algunas publicaciones de la época. Sólo Nernst le atribuye un mayor significado: en un trabajo publicado en 1916, sugiere que la estabilidad del átomo puede deberse al balance alcanzado por los electrones atómicos entre la potencia que disipan éstos por radiación (por tratarse de cargas aceleradas) y la que absorben del campo fluctuante. Esta observación sugerente de Nernst es retomada medio siglo después por Trevor Marshall para explorar la posibilidad de que la acción del llamado *campo de punto cero* sea la responsable del comportamiento cuántico de la materia.

Así nace la *electrodinámica estocástica*, teoría que en el transcurso del último medio siglo se ha desarrollado hasta el punto en que ofrece una explicación de las principales características del comportamiento de los sistemas cuánticos como resultado de la interacción de la materia con el campo de punto cero. Esto es tema del [Capítulo 32](#) del presente volumen. Lo que nos interesa resaltar aquí es la presencia de un campo como parte integral del sistema cuántico. La partícula no está sola; está rodeada de este campo fluctuante, que le imprime propiedades ondulatorias. La presencia de objetos

materiales en la vecindad, tales como barreras, pantallas, estructuras cristalinas, ... o simplemente otras partículas, altera la estructura del campo y esta alteración es transmitida a la partícula; se puede decir que la partícula “siente” así la presencia de los objetos en su derredor.

Si se ignora la mediación del campo entre los componentes materiales del sistema, la acción entre ellas aparece como no local; esta es justamente la acción que Einstein calificó como fantasmagórica (“spooky action at a distance”).



**Figura 28.2:** Ilustración esquemática del arreglo experimental empleado en experimentos de gota caminante. La charola que contiene el fluido está colocada sobre una plataforma que vibra sinusoidalmente en el sentido vertical. La gota que rebota sobre la superficie del líquido es iluminada por una lámpara de LED a través de un difusor y su movimiento puede ser registrado por una cámara de alta velocidad que se sincroniza con el vibrador.

#### DUALIDAD ONDA-PARTÍCULA EN SISTEMAS CLÁSICOS

¿Es posible que existan al nivel macroscópico sistemas clásicos de corpúsculos acompañados de ondas, análogos a los sistemas cuánticos?

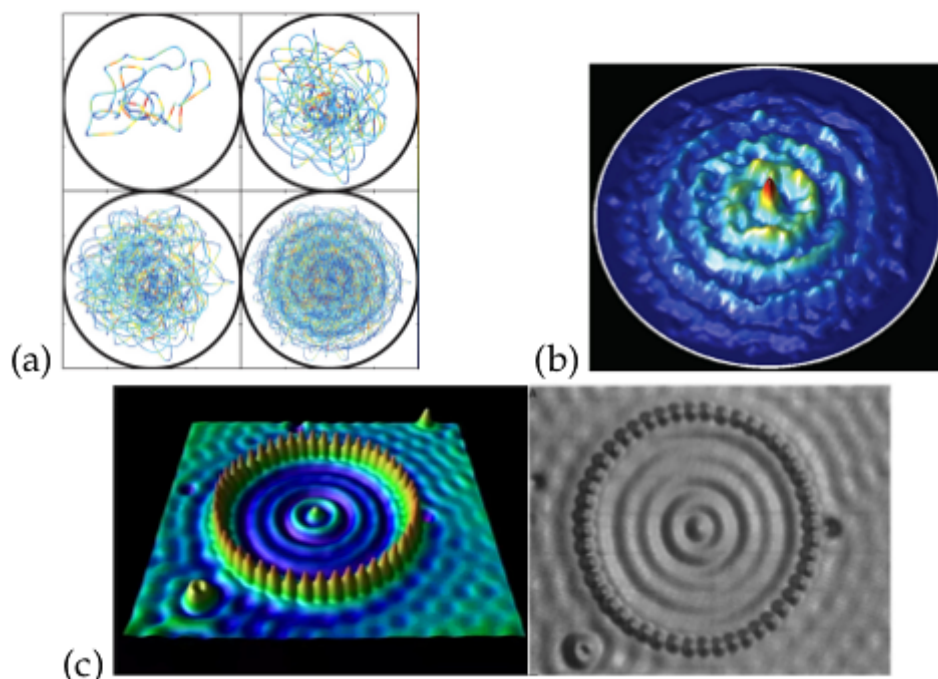
Esta pregunta, que podría antojarse como una mera curiosidad teórica, ha conducido en años recientes a una variedad de experimentos sorprendentes, a partir de la observación de Yves Couder y Emmanuel Fort de las “gotas caminantes” que rebotan sobre la superficie de un fluido puesto a vibrar [3]. El sistema empleado en estos experimentos consiste de una charola pequeña que contiene un fluido de baja viscosidad (normalmente aceite de silicona), montada sobre una plataforma vibratoria (figura 28.2). Con una aguja o palillo se toma una gota del líquido y se le deja caer sobre la superficie. Para determinados rangos de los parámetros (el tamaño de la gota, la altura de la caída, la frecuencia y amplitud de la vibración del líquido),

la gota mantiene su integridad y rebota como una partícula sobre la superficie, al mismo tiempo que se desplaza horizontalmente en trayectoria rectilínea y con velocidad constante mientras no haya un obstáculo en la vecindad. Los bordes de la charola y las irregularidades en el fondo de la misma pueden alterar esta trayectoria.

¿Cómo es que la gota es capaz de rebotar y caminar, en principio indefinidamente? Cada vez que choca con la superficie del fluido, al tiempo que sufre un empujón hacia arriba la gota contribuye con su rebote a la generación de una onda superficial que la acompaña en su trayecto. Es esta onda la que, a su vez, sostiene el movimiento de la gota. Puede decirse que la gota se “autopropulsa” por medio de una interacción resonante con su onda piloto.

Estas gotas caminantes exhiben comportamientos que anteriormente se habían considerado exclusivos del dominio cuántico, tales como cuantización de órbitas, efecto túnel, o movimiento correlacionado de dos gotas vecinas. Un ejemplo ilustrativo es el llamado corral circular [4]. En el plano horizontal, la trayectoria individual descrita por la gota resulta compleja, debido a la interacción de la onda piloto con el borde del corral. Sin embargo, al cabo de muchas vueltas se va delineando un patrón perfectamente regular de distribución de presencia de la gota, como se muestra en la figura 28.3. Al igual que en la mecánica cuántica, la estadística de la gota admite una descripción en términos de una “función de onda” que satisface (aproximadamente) una ecuación lineal.

Aún hace falta más trabajo teórico, experimental y numérico para explorar a fondo las analogías entre el problema hidrodinámico clásico y el problema cuántico que nos ocupa. Sin embargo, es claro que la realización macroscópica clásica de un sistema de partícula-onda abre perspectivas interesantes para una mejor comprensión de la dualidad partícula-onda en la mecánica cuántica. En el caso hidrodinámico, el fluido vibratorio hace las veces de “campo de fondo”; en el caso cuántico es el campo electromagnético de punto cero el candidato natural a jugar este papel. De manera similar a como sucede con la gota en interacción con el fluido, las partículas atómicas adquieren sus propiedades cuánticas por su interacción resonante con modos de este campo, tal como lo sugiere la electrodinámica estocástica. Desde esta perspectiva, el comportamiento ondulatorio que exhiben los electrones y otras partículas al formar patrones de difracción, no es debido a una propiedad innata de la materia sino que emerge de su interacción permanente con el campo de fondo.



**Figura 28.3:** (a) Trayectoria de una gota caminante en un corral circular, registrada a diferentes tiempos de duración. Las variaciones de color representan cambios en la velocidad de la gota en su itinerario. (b) Gráfica que representa la distribución estadística de posiciones de la gota en el corral. *Fuente:* D. M. Harris et al, *Physical Review E* 88, 011001, 2013, figura 3. (c) Densidad de estados de un sistema electrónico en un corral cuántico sobre una superficie metálica, obtenida por espectroscopía de tunelaje. *Fuente:* M. F. Crommie et al, *Science* 262:5131, p. 218, 1993, figura 2.

PARA SABER MÁS:

- L. de la Peña, A. M. Cetto y A. Valdés-Hernández, *The Emerging Quantum*, Springer, Berlin, 2015.
- G. Bacciagaluppi y A. Valentini, *Quantum Theory at the Crossroads: Reconsidering the 1927 Solvay Conference*, Cambridge University Press, 2009).
- Video que muestra la creación gradual de un patrón de difracción de electrones: [Controlled double-slit electron diffraction: electron build-](#)



[dup pattern](#), tomado de [1].

- Video que muestra la dinámica de gotas caminantes: [The pilot-wave dynamics of walking droplets](#).

#### REFERENCIAS

- [1] R. Bach, D. Pope, S.-H. Liou y H. Batelaan, «Controlled double-slit electron diffraction», *New Journal of Physics*, vol. 15, n.º 3, pág. 033 018, mar. de 2013.
- [2] R. P. Feynman, R. B. Leighton y M. L. Sands, «Chap. 1. Quantum Behavior», en *The Feynman lectures on physics*, vol. III, Redwood City, Calif.: Addison-Wesley, 1989.
- [3] Y. Couder, S. Protière, E. Fort y A. Boudaoud, «Walking and orbiting droplets», *Nature*, vol. 437, n.º 7056, págs. 208-208, sep. de 2005.
- [4] J. W. M. Bush, «The new wave of pilot-wave theory», *Physics Today*, vol. 68, n.º 8, pág. 47, jul. de 2015.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

## PARTÍCULAS IDÉNTICAS E INDISTINGUIBILIDAD

*Miguel Ángel Solís\**

En física clásica es frecuente tratar con partículas cuyas propiedades físicas son idénticas pero aún así las podemos distinguir por sus trayectorias en el espacio al transcurrir el tiempo. Esto es posible porque no existe límite en la precisión con que podemos medir la posición y/o el momento lineal de las partículas pero, además, lo podemos hacer de manera independiente sin que la medición de una de las variables afecte la medición de las otra. En la mecánica cuántica el principio de incertidumbre de Heisenberg nos limita a conocer simultáneamente la posición y el momento lineal de una partícula a valores tales que el producto de sus incertidumbres sea mayor o igual a  $\hbar/2$  con  $\hbar = h/2\pi$  y  $h$  la constante de Planck, imposibilitándonos a distinguir las mediante sus trayectorias. El principio de indistinguibilidad va más allá al darle el carácter de indistinguibles a las partículas con propiedades físicas idénticas, al grado de que en un sistema de muchas partículas idénticas sólo son posible aquellos estados que no cambian ante el intercambio de dos de ellas. Éste es un principio fundamental que define a la actual mecánica cuántica. Tratando de encontrar y mostrar analogías de indistinguibilidad en el mundo macroscópico, muestro algunos ejemplos en los que las capacidades de nuestros sentidos, auxiliados con los instrumentos de medición disponibles, son insuficientes para completar el proceso de distinguir.

## EL MUNDO DE LOS SENTIDOS

Los humanos usamos nuestros sentidos (olfato, visión, tacto, audición y el gusto) para conocer una parte del mundo que nos rodea el cual es definido en términos de los alcances (o limitaciones) de los sentidos. Por ejemplo,

---

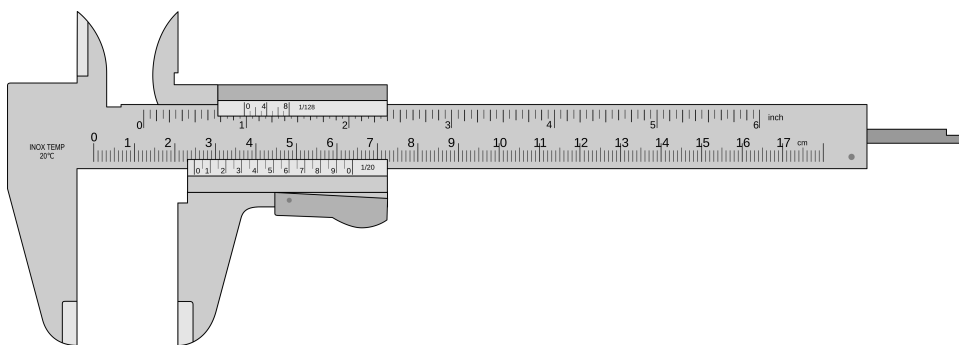
\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

podemos oír sólo los sonidos cuyas frecuencias se encuentran dentro del intervalo de 20 a 20 000 ciclos por segundo o Hertz. Las ondas de un sismo o las ondas de choque que se aplican en el proceso de litotricia (romper piedras del riñón con sonido), tienen frecuencias menores a 20 Hertz por lo cual no podemos escucharlas. Tampoco podemos escuchar los chillidos de los murciélagos cuyas frecuencias son del orden de los 50 000 Hertz. La vista nos permite procesar ondas electromagnéticas cuyas frecuencias se encuentran en el intervalo que conocemos como el visible, es decir, entre 789 (luz violeta) y 484 (luz roja) TeraHertz ( $= 10^{12}$  Hertz) que corresponden a las longitudes de onda 380 nm hasta 620 nm ( $= 10^{-9}$  metros), respectivamente. Ondas electromagnéticas con frecuencias más altas como las de los rayos X o más bajas como las ondas de radio, no las podemos ver. Similarmente, en el olfato y en el gusto tenemos limitaciones; sabemos de la existencia de umbrales no cuantificados pero es bien sabido que los perros tienen varias veces más olfato y oído que el ser humano. También sabemos que hay personas que han desarrollado el sentido del gusto más allá de lo normal y que les permite ser catadores de vinos o alimentos.

En este pequeño mundo de los sentidos distinguir objetos es un proceso que realizamos frecuentemente durante el día. En las mañanas cuando nos levantamos, excepto por nuestra cama, todo el alrededor pareciera que está igual como lo dejamos la noche anterior: la ropa, la mesa de noche, la computadora, el libro, etc. El proceso de comparación implica el tiempo y el espacio; comparamos las posiciones de las cosas en el espacio a dos tiempos distintos. El proceso de distinguir es más consciente cuando vamos al supermercado y queremos comprar las mejores frutas. En algunas frutas es fácil diferenciar para escoger las mejores, pero en otras no. Por ejemplo, para escoger una papaya nos fijamos en: la de mayor tamaño (*volumen*) porque la proporción desperdiciada (la cáscara) respecto al total es menor; la de *color* menos pálida, indica el tiempo de madurez; su respuesta a la presión táctil nos indica si la fruta tiene magulladuras que no deseamos. El proceso de selección es menos fácil cuando se trata de escoger naranjas de la misma cosecha y que han pasado por el proceso de separación por tamaño; casi son idénticas y sólo nos queda echarlas a la bolsa sin intentar distinguir las. El proceso se complicaría si quisiéramos seleccionar los frijoles hasta completar el kilogramo solicitado.

## INCERTIDUMBRE EN LA MEDICIÓN

Cuando los sentidos no son suficientes para distinguir objetos, nos auxiliamos con instrumentos para resaltar diferencias y cuantificarlas. En el proceso de medición de un objeto comparamos el objeto con un patrón de medida que en el Sistema Internacional de Unidades son siete. Sin embargo, para cuantificar todas las cantidades físicas que aparecen en la mecánica clásica son suficientes tres cantidades físicas fundamentales y sus unidades, es decir: longitud en metros; masa en kilogramos; y el tiempo en segundos. Una regla común de un metro de longitud viene dividida en centímetros y subdividida en milímetros. Supongamos que queremos distinguir entre dos tornillos (o tuercas) que a nuestros ojos parecen iguales en todas sus características esenciales (color, diámetro, ...), excepto quizás en su longitud. Para saber si son iguales en longitud usamos la regla. Nótese que con la regla vamos a poder distinguir diferencias de longitud mayores a un milímetro. Si la diferencia entre los tornillos es menor a un milímetro, la regla no nos servirá para distinguirlos. La longitud de cada uno de los tornillos la damos como un número entero de milímetros con una incertidumbre de más o menos medio milímetro.



**Figura 29.1:** Vernier con una precisión de 0.001 pulgadas = 0.025 mm. Ilustración de Joaquim Alves Gaspar, distribuida bajo la licencia [CC BY-SA 3.0](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/).

Es decir, con este instrumento de medida no podremos distinguir entre tornillos cuya diferencia de longitudes sea menor a un milímetro; llegamos a *no poder distinguir* entre dos objetos, o entre muchos más, cuya diferencia entre sus longitudes sea menor a un milímetro. Si la diferencia entre las longitudes es de décimas de milímetros, podemos utilizar otro instrumento, por ejemplo un Vernier (ver figura 29.1), que nos permita hacer diferencias hasta de centésimas de milímetros. Pero de nuevo habrá una incertidumbre

en la medida que cada vez será más pequeña pero allí estará. Este proceso pareciera que lo podríamos continuar “ad infinitum” sin ninguna limitación más que la posibilidad de contar con el instrumento adecuado; por supuesto la incertidumbre tendería a cero. Pero, en la práctica, ¿verdaderamente podríamos continuar sin ninguna limitación? ¿Siempre podríamos construir el instrumento adecuado?

#### INDISTINGUIBILIDAD EN LA GENÉTICA

No es raro mirar a dos hermanos gemelos y no poder distinguirlos aunque ya hayamos tenido contacto previo con ellos; el sentido de la vista no nos es suficiente. Muchas veces el oírlos hablar nos da indicios para diferenciarlos. Si aún no los podemos distinguir siempre queda la posibilidad de preguntarle a su mamá quién es quién. Gemelos los hay monocigóticos (o idénticos) que provienen de un mismo óvulo o dicigóticos (cuates, fraternos o mellizos) que provienen de óvulos distintos fecundados por dos espermatozoides. Los gemelos monocigóticos tienen el mismo ADN por lo que todos los procedimientos en los que se usa el ADN para distinguir a las personas no funciona con ellos. Los forenses, quienes usan el estudio de ADN de las personas como un elemento determinante para distinguir entre presuntos culpables de un delito, no podrían distinguir entre dos gemelos idénticos. Tampoco el ministerio público, a partir del ADN, podría determinar quién de los gemelos idénticos es el padre de un hijo en discordia.

Afortunadamente hay muchas características que hacen diferentes a los gemelos. Estas características diferentes se van generando desde el momento de la concepción. Por ejemplo, las huellas dactilares de los gemelos idénticos son diferentes. Las huellas se van formando en el vientre materno, del contacto de las manos del gemelo con su entorno, es decir, la placenta e indirectamente con el útero; los gemelos pueden o no compartir la misma placenta. Las diferencias se van haciendo mayores conforme pasa el tiempo y ambos están expuestos a condiciones externas diferentes. El mismo nacimiento los hace diferentes: uno nace primero y el otro después. Cuando los gemelos son adultos mayores seguramente tienen muchas más diferencias que cuando son jóvenes, como resultado de haber estado en condiciones diferentes a lo largo de sus vidas.

Note que cuando los padres no son capaces de distinguir a sus hijos gemelos, les ponen identificadores tales como brazaletes de diferentes colores. ¿Se podría hacer lo mismo con los electrones?

## DISTINGUIBILIDAD EN MECÁNICA CLÁSICA

En la mecánica clásica tratamos con entes completamente distinguibles. Aunque tratemos con bolas de billar idénticas, es decir, del mismo tamaño, color y del mismo material homogéneo, siempre podemos distinguirlas por su posición en el espacio. Sin embargo, cuando se discute el choque frontal de dos bolas de billar idénticas, desde un sistema de referencia donde una de las bolas está quieta y la otra se acerca con una velocidad constante, al momento del choque la que se estaba moviendo se para y la que estaba quieta sale con una velocidad igual a la que traía la que se paró. Si durante la observación eliminamos esa fracción de tiempo que dura el choque, después del choque podríamos asegurar dos cosas: a) lo que sabemos, que la incidente se para y la quieta se empieza a mover con la misma velocidad de la incidente, o b) que la bola incidente atravesó a la bola parada y continuó con su movimiento sin afectación. Esta situación es más evidente cuando ambas bolas se acercan una a otra a velocidades diferentes; después del choque las bolas intercambian velocidades como si simplemente se penetraran entre sí y continuaran su movimiento de velocidad constante; esto me recuerda lo que sucede cuando dos ondas unidimensionales inciden de frente, las ondas se superponen constructivamente en el punto de incidencia pero después continúan inalteradas. ¿Por qué no decimos que las ondas chocan y se regresan intercambiando velocidades? ¿Hay manera de distinguir una situación de la otra?

En el caso de las bolas de billar idénticas, sus tamaños y el tiempo continuo nos permite elegir el inciso a) arriba mencionado. Pero, si disminuimos los radios de las bolas de billar hasta convertirlas en partículas puntuales, la indistinguibilidad de las partículas antes y después del choque es completa.

## INDISTINGUIBILIDAD EN MECÁNICA CUÁNTICA

En mecánica cuántica el concepto de trayectoria se pierde ya que el principio de incertidumbre de Heisenberg [1] nos limita a conocer simultáneamente la posición y la cantidad de movimiento de las partículas con una precisión tal que el producto de sus incertidumbres sea mayor o igual a  $\hbar/2$  con  $\hbar = h/2\pi$  y  $h = 6.6260693 \times 10^{-34}$  J·s la constante de Planck. De tal suerte que las partículas idénticas que en mecánica clásica son distinguibles por su trayectoria en el espacio, en mecánica cuántica se vuelven indistinguibles [2].

La indistinguibilidad de las partículas idénticas tiene consecuencias asom-

brosas en el comportamiento de la naturaleza. El número de microestados diferentes generados con un número dado de microcomponentes es menor a aquél en que las componentes del sistema macrocópico son distinguibles.

Los estados de la materia se describen con funciones de onda compleja dependiente de las coordenadas de todas las partículas componentes. La densidad de probabilidad de encontrar una distribución espacial de las partículas está dada por la magnitud al cuadrado de la función de onda. Como las partículas son indistinguibles, cualquier intercambio entre dos de ellas debe dejar la magnitud de la función de onda inalterada. Por ejemplo, si  $\Psi(X_1, X_2, \dots, X_i, \dots, X_j, \dots, X_N)$  es la función de onda de un sistema compuesto de  $N$  partículas, donde  $X_1, X_2, \dots, X_N$ , denotan las posiciones (podrían incluir el espín) de las partículas, entonces ante el intercambio de posiciones de la *i*ésima y la *j*ésima partículas, la funciones de onda de antes y después del intercambio satisfarían

$$\Psi(X_1, X_2, \dots, X_i, \dots, X_j, \dots, X_N) = e^{i\alpha} \Psi(X_1, X_2, \dots, X_j, \dots, X_i, \dots, X_N),$$

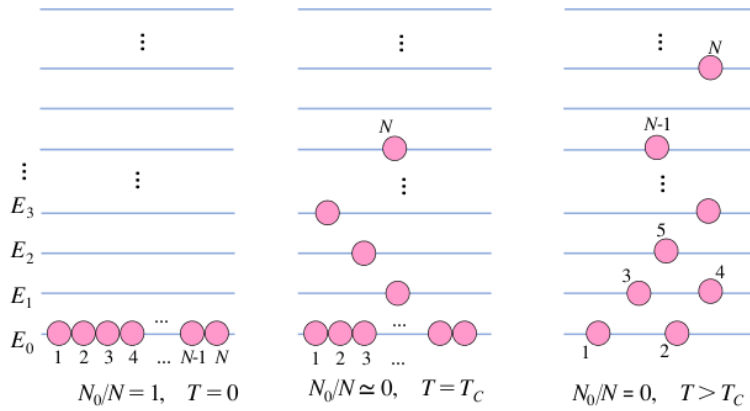
con  $\alpha$  una constante real. Si volvemos a intercambiar las partículas, el segundo miembro de la ecuación anterior nos quedaría como  $e^{2i\alpha} \Psi(X_1, X_2, \dots, X_i, \dots, X_j, \dots, X_N)$  de tal forma que igualando con el primer miembro de la igualdad anterior concluimos que  $e^{2i\alpha} = 1$  o  $e^{i\alpha} = \pm 1$ , es decir,

$$\Psi(X_1, X_2, \dots, X_i, \dots, X_j, \dots, X_N) = \pm \Psi(X_1, X_2, \dots, X_j, \dots, X_i, \dots, X_N).$$

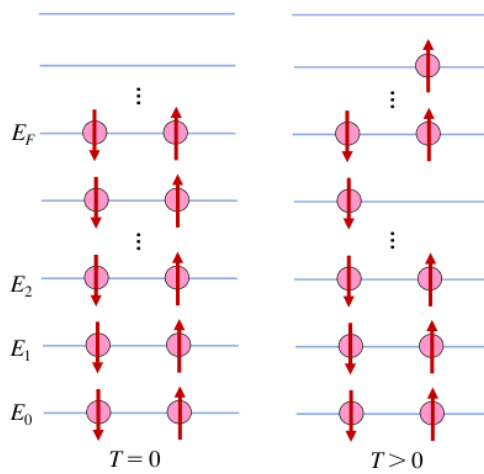
De aquí que ante el intercambio de posiciones de dos partículas cualesquiera, la función de onda podrá cambiar a lo más en un signo, de tal forma que la magnitud de la función de onda queda inalterada [3]. Si la función de onda cambia de signo decimos que es antisimétrica, si no, la función de onda es simétrica. Aquellas partículas que se describen con funciones de onda simétricas las conocemos como *bosones* y que son aquellas que tienen espín entero tales como los fotones, los átomos de helio-4, rubidio-87 ( $^{87}\text{Rb}$ ), litio-7 ( $^7\text{Li}$ ), sodio ( $^{23}\text{Na}$ ), potasio ( $^{39}\text{K}$ ), hidrógeno ( $^1\text{H}$ ),... Las partículas que se describen con las funciones de onda antisimétricas son los *fermiones* y que tienen espín semientero tales como el electrón, el protón, el isótopo fermiónico potasio ( $^{40}\text{K}$ ),... El que las partículas constituyentes de un sistema sean bosones o fermiones se reflejará, más notoriamente, a temperaturas cercanas al cero absoluto ( $-273.15^\circ\text{C}$ ), donde los sistemas bosónicos se comportan completamente diferente a los fermiónicos. Si las partículas son bosones, no hay límite en el número de ellas que pueden estar en un mismo estado, tienden a ser gregarias. Esta cualidad las lleva a presentar fenómenos que no tienen análogos clásicos, como la condensación



*Bosones*



*Fermiones*



**Figura 29.2:** Bosones y fermiones ocupando niveles de energía de partícula libre.  $N_0$  es el número de partículas en el estado base.

Bose-Einstein y la superfluidez [4, 5]. Los fermiones al contrario tienden a separarse unos de otros al grado de que no pueden estar dos en el mismo estado como consecuencia del principio de exclusión de Pauli [6]. Como las partículas fermiónicas tienen espín semientero  $\pm n/2$  (en unidades de  $\hbar$ )

con  $n$  entero impar, en ausencia de un campo magnético externo, fermiones con diferentes espines presentan la misma energía. Por ejemplo, el electrón tiene espín  $\pm 1/2$ , por lo que los estados con espines  $+1/2$  y  $-1/2$ , tienen la misma energía. En la figura 29.2 se muestra los niveles de energía de una partícula libre (en ausencia de un campo de fuerzas externo) ocupados por  $N$  bosones (mitad de arriba) y por  $N$  fermiones (mitad de abajo). A  $T = 0$  parejas de electrones con espines opuestos acceden a los niveles de energía desde el de menor energía hasta el de mayor energía conocido como el nivel de Fermi. Conforme aumenta la temperatura los fermiones cercanos al nivel de Fermi pasan a niveles de energía más altos [7]. En el caso de los bosones, a  $T = 0$  las  $N$  partículas se encuentran en el nivel de energía más bajo. Conforme aumenta la temperatura las partículas empiezan a poblar los niveles de energía más alta, pero sólo cuando la temperatura es mayor a una temperatura crítica  $T_c$ , el nivel de energía más baja queda notoriamente despoblado. La temperatura crítica es asociada al fenómeno de la condensación Bose-Einstein [8, 9].

En resumen, distinguir con los sentidos tiene como límite la capacidad misma de los sentidos. Los científicos se han ayudado de instrumentos (microscopios, telescopios, láseres, ...) para hacer medidas directas o indirectas y detectar diferencias entre objetos que a la "luz" de los sentidos nos parecen iguales. Los instrumentos que miden las características esenciales de los objetos nos han mostrado que para ser exactos debemos siempre incluir una incertidumbre en la medida. En la mecánica clásica se afirma la posibilidad de dar al menos la posición y el momento de las partículas con precisión sin límite haciendo posible dar las trayectorias de partículas idénticas sin ambigüedad y distinguiéndolas. Sin embargo, la mecánica cuántica tiene en su esencia la imposibilidad de dar simultáneamente la posición y el momento de las partículas con incertidumbres menores a aquellas que al multiplicarlas el producto sea igual o menor a la constante  $\hbar/2$ . El principio de indistinguibilidad es uno de los pilares de la actual mecánica cuántica que nos ha hecho progresar en el entendimiento de la naturaleza y en particular del mundo microscópico. No obstante, entender a mayor profundidad el principio de indistinguibilidad o indeterminación sigue siendo un reto que motiva la revisión de su origen y su aplicabilidad así como sus consecuencias en la evolución de la mecánica cuántica.

## REFERENCIAS

- [1] G. Gamow, «The Principle of Uncertainty», *Scientific American*, vol. 198, págs. 51-57, ene. de 1958.
- [2] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloë, *Quantum mechanics*. New York: John Wiley & Sons, 1977.
- [3] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics*. Oxford: Pergamon Press, 1977, vol. 3.
- [4] W. P. Halperin, «Eighty years of superfluidity», *Nature*, vol. 553, n.º 7689, págs. 413-414, ene. de 2018.
- [5] E. M. Lifshitz, «Superfluidity», *Scientific American*, vol. 198, págs. 30-35, jun. de 1958.
- [6] G. Gamow, «The Exclusion Principle», *Scientific American*, vol. 201, págs. 74-86, jul. de 1959.
- [7] M. Casas, M. Fortes, S. Fujita y col., «Condensación de Bose-Einstein y superconductividad», *Ciencia y Desarrollo, CONACYT*, vol. 22, n.º 129, págs. 42-47, 1996.
- [8] MIT-Harvard, Center for Ultracold Atoms. dirección: [https://www.rle.mit.edu/cua\\_responsive/](https://www.rle.mit.edu/cua_responsive/) (visitado 19-02-2020).
- [9] JILA BEC & Ultracold Atoms. dirección: <https://jila.colorado.edu/bec/> (visitado 19-02-2020).

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

## CUASIPARTÍCULAS ... ¿SON REALES?

*Víctor Romero Rochín\**

La conclusión de que toda la materia en el universo está compuesta por átomos y moléculas es uno de los más grandes éxitos de la física. Esto nos lleva a considerar que la descripción de la naturaleza, en términos de lo que hace cada átomo o partícula que componen a un cuerpo, sea la más fundamental. Sin embargo, cuando se tienen muchos átomos, emerge una descripción alternativa en términos de las llamadas cuasipartículas, que son excitaciones colectivas del conjunto de átomos. En este ensayo elaboramos sobre la pregunta si ambas son igualmente fundamentales en la descripción del mundo que nos rodea, o no.

La hipótesis atómica de la composición de la materia es uno de los paradigmas de la descripción actual que tenemos de toda la naturaleza. Desde los trabajos de Maxwell, Boltzmann, van der Waals y Einstein, hasta el desarrollo de la mecánica cuántica iniciada por Planck y seguida por el mismo Einstein, Rutherford, Bohr y muchos más, llegamos a lo que Feynman ha llamado el descubrimiento más grande de la humanidad: toda la naturaleza está compuesta de átomos y moléculas ... y quizás deberíamos agregar, de radiación electromagnética, que también está compuesta de sus "átomos", los fotones. Pero el punto es que parece que tenemos muy claro que esos objetos *localizados espacialmente*, que llamamos átomos ó partículas, son los "entes fundamentales" de lo que todo está compuesto<sup>1</sup>. Esta aceptación está, en gran medida, a la par con la llamada descripción *reduccionista* de la materia y de la naturaleza misma.

---

\*Departamento de Física Cuántica y Fotónica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

<sup>1</sup>Por supuesto que estamos simplificando el enunciado. Uno más preciso sería indicar que los entes fundamentales son las partículas elementales del Modelo Estándar. Como se verá en el escrito, tal imprecisión no cambia la esencia del argumento que se desarrolla.

Es decir, tendemos a creer que si conocemos las partes del todo, es decir, los átomos que componen a un cuerpo macroscópico, entonces conoceremos en gran medida el comportamiento de ese cuerpo. A final de cuentas, la receta está aparentemente clara: escriba usted la ecuación de Schrödinger de todos esos átomos, o las ecuaciones de Hamilton si resulta que la mecánica clásica es una buena aproximación ¡y resuélvalas! El comportamiento de ese cuerpo, compuesto por un número arbitrariamente enorme de átomos, quedaría descrito. De hecho, esta es la idea detrás de las simulaciones computacionales, que han tenido un gran éxito.

Cabe el insistir, por razones de exposición, que tendemos a llamar “partícula” a un objeto “pequeño” que tiene cierta identidad en el sentido que podemos, en principio, medir su posición en un instante dado. Si el movimiento de la partícula obedece la mecánica clásica, entonces nos la imaginamos como una pelotita que se mueve y que choca con otras similares al ser parte de un cuerpo más grande. Por otro lado, si la mecánica cuántica es necesaria para describir la dinámica de la partícula, entonces nos enfrentamos a la llamada dualidad onda-partícula en la que ciertas propiedades requieren de suponer que la partícula se “comportó” como onda. Sin embargo, en cualquier instancia ya sea clásica o cuántica, si *midiéramos* la posición de la partícula, siempre encontraríamos que se halla en un punto dado del espacio. Es a esto a lo que llamamos *localizado espacialmente*.

Lo interesante, y el tema de este ensayo, es que existe una forma alternativa y complementaria de resolver el problema arriba mencionado, pero que es esencialmente *espacialmente deslocalizada* pero que, en principio, nos da la misma información que la anterior. Estamos hablando de lo que llamamos modos colectivos, excitaciones elementales o, también, cuasipartículas, y que sólo tienen sentido si el número de átomos es mayor a uno y que tienen su máximo potencial de predicción y aplicabilidad cuando ese número de átomos es enorme, digamos  $10^{20}$ . Esta forma alternativa, aunque en un sentido estricto es matemáticamente equivalente a la anterior, muchas veces y de manera tácita, tendemos a considerarla “menos” fundamental que la visión individual atómica. Tendemos a pensar que lo colectivo *emerge* de la suma de las individualidades atómicas. Lo que pretendemos en este breve escrito es, primero, ejemplificar lo que son los modos colectivos o las cuasipartículas, así como su importancia y aplicabilidad y, luego, retomaremos el hecho de que son tan fundamentales como los átomos mismos, tal que argüiremos que bien podría ser al revés, que lo colectivo fuera lo fundamental y que lo individual fuera lo que emergiera. Especulamos que la asimetría en nuestra percepción radica en el hecho que nuestras mediciones

siempre son localizadas en el espacio y que, por lo tanto, la medición de un ente colectivo sólo se infiere de muchas de esas mediciones localizadas. De cualquier manera, concluiremos que ambas son igualmente válidas.

La fenómenos físicos que observamos sólo ocurren si el sistema bajo observación tiene más de una partícula. La mecánica de Newton nos dice que si sólo se tuviese una partícula de masa  $m$ , ésta permanecería en movimiento rectilíneo uniforme con velocidad constante, con respecto a un marco de referencia inercial. Para que cambie su movimiento se necesita una fuerza y, ésta, a su vez la imprime al menos una segunda partícula, obedeciéndose la Tercera Ley. Sean, entonces, dos partículas de masa  $m_1$  y  $m_2$  interactuando por medio de un potencial  $U = U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$  que, por la ley mencionada, sólo puede depender del vector que une las partículas. Desde el punto de vista individual, el movimiento lo describen las correspondientes ecuaciones de Newton,

$$m_1 \frac{d^2 \vec{r}_1}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}_1} U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) ; \quad m_2 \frac{d^2 \vec{r}_2}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}_2} U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad (30.1)$$

bajo condiciones iniciales dadas. Como bien sabemos de los cursos elementales de mecánica clásica, una forma alternativa de resolver el problema es transformarlo a coordenadas relativas  $\vec{r}$  y de centro de masa  $\vec{R}$ , dadas matemáticamente por una transformación lineal de coordenadas, a saber,

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 ; \quad \vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}. \quad (30.2)$$

Esta transformación da lugar a las siguientes ecuaciones de movimiento

$$\mu \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} U(\vec{r}) ; \quad M \frac{d^2 \vec{R}}{dt^2} = 0, \quad (30.3)$$

donde  $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  y  $M = m_1 + m_2$  son las llamadas masas relativa y total. Observamos, entonces, que estas últimas ecuaciones corresponden al movimiento de dos "partículas", llamémoslas cuasipartículas, de masas  $\mu$  y  $M$  con coordenadas respectivas  $\vec{r}$  y  $\vec{R}$ . Por la transformación de las ecuaciones (30.2), la solución a las ecuaciones (30.1) es completamente equivalente a la de las ecuaciones (30.3). Decimos que describen al mismo sistema y a la misma dinámica, sólo que desde una perspectiva diferente. Sin embargo, mientras que tendemos a adjudicarle "realidad" o tangibilidad a las partículas  $m_1$  y  $m_2$ , a las otras sólo las consideramos como una forma práctica y conveniente de resolver el problema; de hecho, es mucho más fácil resolver (30.3) que (30.1). La pregunta que abordamos aquí

es si las cuasipartículas  $\mu$  y  $M$  son tan reales o tangibles como las  $m_1$  y  $m_2$ . Una probable respuesta podría estar basada en el hecho que tenemos la sensación o certeza de que podemos medir las posiciones  $\vec{r}_1$  y  $\vec{r}_2$ , mientras que  $\vec{R}$  y  $\vec{r}$  las tendríamos que inferir *después* de conocer las anteriores. Sin embargo, ese es un problema “nuestro”, no de la teoría, que es el instrumento que nos permite entender el escrutinio de la naturaleza por medio de experimentos. El asunto se pone un poco más complicado si ahora suponemos que las partículas obedecen la mecánica cuántica. Sin entrar en detalles, podemos mostrar que ahora se tienen ecuaciones de Schrödinger y relaciones de conmutación, tanto para la versión de partículas como para la de cuasipartículas. Y por supuesto, cada una de ellas obedece el principio de incertidumbre en su propia versión. Es decir, de acuerdo a la mecánica cuántica se sigue que podríamos medir la posición  $\vec{R}$  pero no su momento  $\vec{P}$ , o viceversa, pero sin ninguna prohibición en medir dichas variables de las cuasipartículas. ¿Cómo lo haríamos? eso parece ser, de nuevo, un problema de la forma en la que los humanos interactuamos con la Naturaleza y no de ella misma.

Es evidente que podemos complicar más el debate si ahora consideramos no dos, sino tres o más partículas. Apelaríamos ahora al concepto de modos normales y sus interacciones. Y ahora sí, como mencionamos en los párrafos introductorios, el concepto de modo colectivo o cuasipartícula adquiere una relevancia profunda cuando el sistema bajo estudio está formado por un número enorme de átomos y no sólo de unos cuantos. En ese caso, emerge uno de los conceptos más trascendentes de la física, que es el de *onda*. Y no necesitamos hablar de objetos exóticos, pensemos en las ondas de una cuerda tensa o en las ondas de sonido que nos permiten escuchar lo que sucede a nuestro alrededor. Son el resultado de movimientos locales, pero coordinados, de la miriada de átomos que componen a cualquier cuerpo o sistema macroscópico. Las ondas tienen la incómoda propiedad de que no podemos decir “en que punto del espacio” están: lo están en todo o, al menos, en una parte extendida del cuerpo. Por otro lado, sabemos que transmiten energía y cantidad de movimiento (¡por eso escuchamos!) y existen muchas maneras de medir, sí, indirectamente, su presencia. Lo relevante de esta discusión es que las ondas son también cuasipartículas que pueden describirse tanto clásica como cuánticamente. Y ahora entra otra complicación más: las ondas, digamos las sonoras en el aire, al cuantizarse, pueden ser tanto “ondas” como ¡partículas! cuánticas, es decir, iniciaron como el movimiento colectivo de muchos átomos, se convirtieron en ondas y, por ser cuánticas, son también partículas. De hecho, el formalismo de se-



gunda cuantización en la teoría de los muchos cuerpos tiene su mayor éxito cuando se expresa en términos de la creación y aniquilación tanto de átomos o de partículas elementales como de las cuasipartículas mismas. Así, por ejemplo, tenemos que la descripción de la resistencia eléctrica de los electrones al viajar por el seno de un metal, se logra perfectamente como la consecuencia de las colisiones de los electrones con los fonones del material, siendo estos últimos la versión de partícula cuántica ¡de las ondas sonoras del metal! . . . se perdió todo vestigio de quién era átomo, quién cuasipartícula, quién onda, quién partícula. Y todos son tan reales y susceptibles de ser medidos, los unos como los otros, de acuerdo a la teoría.

Pero no queda ahí. Las partículas se pueden “mezclar” con las cuasipartículas dando lugar a otras cuasipartículas, que son las responsables de explicar algunos fenómenos. Un ejemplo notorio son los *polaritones*. Cuando se le hace incidir radiación electromagnética a un material sólido que, a su vez, admite la presencia de una clase de fonones llamados ópticos (que son también oscilaciones locales y coordinadas de los átomos del cristal en cuestión), los fotones de la radiación electromagnética interactúan con esos fonones ópticos y se pueden combinar entre ellos, dando lugar a una nueva excitación colectiva llamada polaritón, que no es ni fotón ni fonón, es una cuasipartícula diferente, tan válida como cualquier otra. En diversos materiales existen fonones, magnones, polaritones, rotones, polarones, plasmones, . . . y parecería que la lista no tiene fin todavía.

Terminamos esta breve discusión recalcando que uno de los grandes problemas de la ciencia, desde el nacimiento de la termodinámica en el siglo XIX hasta nuestros días, es el llamado *problema de los muchos cuerpos*, no resuelto todavía. Grandes pensadores, como Feynman, nos han hecho meditar sobre la dificultad de que con nuestras herramientas de cómputo actuales no podemos resolver las ecuaciones de Schrödinger de un cuerpo macroscópico con, digamos,  $10^{20}$  átomos y nos han sugerido que deberíamos buscar la manera de tener simuladores o computadoras cuánticas que nos permitiesen abordar esos problemas. Esto es un gran reto. Por otro lado, aunque estamos convencidos de la existencia de los átomos, es cierto también que muchos fenómenos sólo son bien comprendidos si apelamos a las cuasipartículas; por ejemplo, para entender la existencia de los superfluidos, que carecen de viscosidad, suponemos que esa viscosidad es el resultado de la transferencia de energía entre cuasipartículas. No tenemos una visión atómica de ese fenómeno en estos momentos. En una forma más amplia, hemos aprendido que el comportamiento de los sistemas de muchos átomos es muy complicado y, nos atrevemos a decir, todavía impredecible,

debido que el total es mucho más que la suma de sus partes. Aquí sólo hablamos de la necesidad de apelar a las cuasipartículas, sin embargo, existen fenómenos tan comunes como las transiciones de fase de cualquier sustancia, por mencionar uno, que sólo ocurren en conjuntos de muchos átomos, comportamiento sin sentido para agregados de unos cuantos. Usamos entonces términos elegantes, como la “emergencia de la complejidad”, para señalar que la colectividad tiene sus propias reglas que no necesariamente están registradas o contenidas en los átomos de manera individual, sino en la colectividad misma. No sabemos bien a bien. ¿Será que la colectividad es la fundamental y que nosotros, debido a nuestras limitaciones y a nuestras preconcepciones reduccionistas, hemos inventado el concepto atómico para asirnos de ellos en la descripción de un mundo que nos queda enorme?

PARA SABER MÁS:

- Landau, L. y Lifshitz, L., *Statistical Physics I and II*, 3a. Ed. Pergamon Press, Oxford, 1980. Excelente textos de termodinámica, física estadística y teoría cuántica de muchos cuerpos.
- Madelung, O., *Introduction to Solid-State Theory*, 1a. Ed. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1978. Texto clásico de la visión cuántica de las excitaciones elementales o cuasipartículas en los sólidos.
- Laughlin, R. B., *A Different Universe*, 1a. Ed. Basic Books, Cambridge, MA, 2005. Un libro con una visión retadora donde se elabora sobre la posibilidad de que lo emergente sea lo atómico y no lo macroscópico.
- Feynman, R. P., *Simulating Physics with Computers*, International Journal of Theoretical Physics, Vol. 21, p. 467, 1982. Este no es un artículo científico, es una transcripción de la famosa conferencia de Richard P. Feynman, donde introdujo la idea de las computadoras cuánticas.

## CUANDO NEWTON Y SCHRÖDINGER SE ENCUENTRAN

*Andrea Valdés Hernández\**

Una rasgo característico de la teoría cuántica es que permite conocer las propiedades dinámicas de partículas estudiando la evolución de una función con propiedades ondulatorias. Dicha función, solución de la ecuación de Schrödinger, posee información probabilística sobre la ubicación de las partículas, lo que ha conducido a la usual forma de representar un corpúsculo en términos de un paquete de ondas suficientemente localizado, y a la consecuente interpretación del teorema de Ehrenfest como un límite en el que las ecuaciones de movimiento cuánticas convergen con las clásicas. En este capítulo revisaremos críticamente dicha interpretación, mostrando que la convergencia entre el régimen cuántico y el clásico es en realidad más intrincada de lo que parece.

## ¿ONDA, PARTÍCULA, O NINGUNA DE LAS ANTERIORES?

La mecánica cuántica predice fenómenos fascinantes que desafían nuestro entendimiento en forma tan dramática como quizá ninguna otra teoría lo haya hecho antes en la física. ¿Por qué? Una razón central es que la mecánica cuántica incorpora elementos *ondulatorios* en la descripción del comportamiento dinámico de *partículas*. Esta peculiaridad es herencia de una hipótesis trascendental planteada por Louis de Broglie en 1924, que establece que cada corpúsculo material tiene asociada una onda (la llamada onda de de Broglie) con características adecuadas. Semejante propuesta, que reúne las nociones de partícula y de onda en un solo fenómeno asociado a la materia, representaba no solo una bella y elegante extensión de la dualidad continuo-discreto que años antes Einstein había atribuido al fenómeno

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

luminoso, sino también un camino para explicar las manifestaciones ondulatorias que exhibe la materia bajo ciertas condiciones.

La dualidad onda-corpúsculo en un sentido más universal nacía entonces, conjuntando dos elementos antagónicos y centrales de los que se había valido la física hasta entonces para describir el mundo: las ondas y las partículas. Unas y otras poseen propiedades distintivas a todas luces incompatibles. Las ondas se extienden en el espacio, y varias de ellas se superponen dando lugar a una nueva onda; a veces una cuya amplitud se incrementa aquí y se anula allá, resultando un patrón de interferencia que identificamos como sello inequívoco del comportamiento ondulatorio. Nada más alejado de lo que se esperaría para una partícula clásica; ésta es una entidad bien localizada en el espacio, que en un instante dado está aquí y en otro posterior allá, viajando con pleno desconocimiento del principio de superposición, y exenta del peligro de anularse en los mínimos de un patrón de difracción.

El puente que tendió de Broglie entre un corpúsculo material y un fenómeno ondulatorio culminó en la edificación de un marco teórico apropiado para describir y descubrir la física de las partículas cuánticas, esto es, corpúsculos que ostentan ciertos aspectos otrora reservados exclusivamente a las ondas. A la cabeza de la nueva teoría se encuentra la ecuación de Schrödinger, que rige la dinámica en el entonces recién descubierto régimen cuántico. Naturalmente, se trata de una ecuación muy singular; entre otras cosas, porque establece la ley de evolución de una función  $\psi(\mathbf{x}, t)$  que constituye el elemento ondulatorio de la teoría (de ahí que se le conozca como función de onda), porta en sí toda la información dinámica del sistema, y sin embargo no constituye variable alguna atribuible a la partícula. Su significado físico se revela en la expresión  $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \rho(\mathbf{x}, t)$ , donde  $\rho(\mathbf{x}, t)$  representa la distribución espacial de las partículas cuánticas, o bien (cuando la función de onda está debidamente normalizada) la probabilidad de que una de ellas se encuentre en un intervalo infinitesimal alrededor de  $\mathbf{x}$  al tiempo  $t$ .

La ecuación primordial de la mecánica cuántica determina entonces la dinámica de una onda cuya amplitud provee información probabilística sobre la ubicación de la partícula. En su calidad de onda, típicamente  $\psi(\mathbf{x}, t)$  es una entidad extendida, lo que implica que en un instante dado existe una probabilidad diferente de cero de encontrar a la partícula dentro de una región amplia del espacio, escenario claramente inapropiado si queremos describir un corpúsculo localizado. La función de onda que podríamos atribuir a una partícula clásica parecería ser entonces una cuya amplitud sea apreciable en una región muy angosta del espacio (donde se localiza

la partícula) y nula fuera de ella. Es evidente que una onda plana monocromática no tiene estas características, pero podemos recurrir al principio de superposición para sumar ondas planas de diferentes frecuencias, de tal forma que interfieran constructivamente en una región pequeña y destructivamente en el resto del espacio. Semejante paquete de ondas representaría así la mejor aproximación a una partícula localizada.

En este régimen, salta la pregunta natural de qué tanto se aproxima la dinámica que predice la ecuación de Schrödinger a la evolución de la correspondiente partícula clásica, regida por las ecuaciones de Hamilton o de Newton. La pregunta es sencilla pero relevante, pues nos introduce al problema central —que se mantiene aún vigente como tema de discusión— de establecer apropiadamente los límites en los que la mecánica clásica se recupera de la mecánica cuántica.

#### LA NATURALEZA DE LAS ECUACIONES CUÁNTICAS Y LAS ECUACIONES CLÁSICAS

Para avanzar en la respuesta a nuestra interrogante, conviene primero volver atrás y hacer hincapié en un punto neurálgico de la teoría cuántica, a saber, que la función de onda —el único elemento dinámico del que se vale dicha teoría para describir la evolución del sistema material— provee información probabilística, y consecuentemente la mejor descripción que ofrece la mecánica cuántica es de índole estadística. Si bien esto hace que la información que arroja la función de onda sea en cierto sentido incompleta, con ella es posible determinar propiedades físicamente relevantes del sistema. En particular, podemos calcular los valores medios de las variables dinámicas así como sus fluctuaciones, pero en general no podemos extraer conclusiones sobre su valor específico en un evento individual. Este indeterminismo (propio de toda descripción probabilística) se contrapone con el carácter determinista de las ecuaciones de Hamilton o de Newton, y acusa una primera diferencia entre la naturaleza de estas últimas y las ecuaciones cuánticas.

La diferencia entre las leyes de la dinámica clásica y cuántica se agudiza aún más debido al elemento ondulatorio impreso (aunque a veces de forma críptica) en el formalismo cuántico, el cual, entre otras cosas, impone cotas mínimas finitas para el producto de las dispersiones de la posición y el momento. Matemáticamente formulada en la desigualdad de Heisenberg, esta propiedad irreductiblemente dispersiva de los sistemas cuánticos acarrea muchas y notables consecuencias; la que ahora viene a cuento es que

en la mecánica cuántica no existe una distribución legítima de probabilidad conjunta en el espacio fase de la partícula; es decir, no existe una función  $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$  que esté exenta de importantes problemas conceptuales y que determine la probabilidad de encontrar a la partícula en una vecindad infinitesimal alrededor de la posición  $\mathbf{x}$  y con momento alrededor de  $\mathbf{p}$  al tiempo  $t$ . Así, acoger el formalismo cuántico implica la renuncia a poder predecir con certeza dónde y cómo estará una partícula en un instante dado, lo que desentona desde un punto de vista fundamental con las leyes dinámicas de la mecánica clásica, que permiten conocer de manera precisa la evolución—esto es,  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{p}$  como función del tiempo— de una partícula.

Lo anterior revela aspectos esenciales que distinguen a las formulaciones clásica y cuántica de la mecánica; ¿dónde podemos entrever entonces alguna similitud entre ambas teorías?

#### DE SCHRÖDINGER A NEWTON

Dado que la dinámica clásica se basa en ecuaciones que establecen directamente la evolución de  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{p}$ , para comparar la predicción clásica con la cuántica se requiere establecer primero una conexión entre la ecuación de Schrödinger, que gobierna la evolución de la función de onda, y alguna expresión cuántica en la que podamos reconocer una ecuación de movimiento referente a las variable dinámicas de la partícula. Las herramientas básicas de la teoría cuántica permiten establecer dicha conexión, y conducen de la ecuación de Schrödinger para una partícula de masa  $m$  a la siguiente pareja de ecuaciones:

$$m \frac{d\langle \mathbf{x} \rangle_\psi}{dt} = \langle \mathbf{p} \rangle_\psi, \quad (31.1a)$$

$$\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle_\psi}{dt} = \langle \mathbf{F}(\mathbf{x}) \rangle_\psi, \quad (31.1b)$$

donde hemos supuesto que el sistema es conservativo, es decir, que existe un potencial  $V(\mathbf{x})$  que da origen a la fuerza  $\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{x})$ .

Notamos aquí que, en concordancia con la naturaleza de la descripción cuántica de la que hablamos antes, las ecuaciones (31.1) no hacen referencia a los valores específicos de las cantidades físicas que ahí aparecen, sino a sus respectivos valores medios (denotados con el símbolo  $\langle \cdot \rangle_\psi$ ) cuando el estado está descrito por la función de onda  $\psi$ . Y notamos también, y sobre todo, la estructura tan familiar que tienen (31.1a) y (31.1b). En efecto, una mirada rápida nos remonta a las ecuaciones del correspondiente problema

clásico para una partícula

$$m \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{p}, \quad (31.2a)$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}), \quad (31.2b)$$

y casi de inmediato concluimos que las leyes de movimiento cuánticas (31.1) son las clásicas (31.2), pero referidas a un corpúsculo cuya posición y momento son, respectivamente,  $\langle \mathbf{x} \rangle_\psi$  y  $\langle \mathbf{p} \rangle_\psi$ .

Sin embargo, tras una segunda mirada a las ecuaciones (31.1b) y (31.2b), nos percatamos de que la afirmación anterior sería cierta *si* se cumpliera que

$$\langle \mathbf{F}(\mathbf{x}) \rangle_\psi = \mathbf{F}(\langle \mathbf{x} \rangle_\psi), \quad (31.3)$$

es decir, si el valor medio de la fuerza en  $\mathbf{x}$  fuera igual a la fuerza evaluada en el valor medio de  $\mathbf{x}$ . Esta condición se satisfará independientemente de  $\mathbf{F}$  y en buena aproximación, siempre que la distribución espacial  $\rho(\mathbf{x}, t)$  sea altamente localizada, con un ancho pequeño en comparación con la escala de distancias en las que la fuerza varía de forma apreciable. Es decir, si  $\psi(\mathbf{x}, t)$  es el paquete de ondas localizado que describimos antes, entonces podemos dar por buena la ecuación (31.3), y de las ecuaciones (31.1) llegamos a que el valor medio de la posición y del momento evolucionan de acuerdo con las leyes clásicas. Este resultado, obtenido originalmente por Paul Ehrenfest en 1927 cuando la teoría cuántica estaba aún en ciernes, lleva el nombre de Teorema de Ehrenfest, y ha sido en ocasiones interpretado como una convergencia entre la dinámica predicha por la mecánica cuántica y la mecánica clásica. No obstante, esta interpretación como el límite clásico de la mecánica cuántica debe tomarse con reservas, como explicaremos en la siguiente sección.

### ¿LÍMITE CLÁSICO?

Si pensamos que el paquete de ondas angosto representa una partícula localizada, entonces la función de onda apropiada para describir un corpúsculo viajero —que continuamente abandona un punto para localizarse en otro— debería ser *en todo momento* un paquete localizado, cuyo centroide  $\langle \mathbf{x} \rangle_\psi$  describe la correspondiente trayectoria clásica. Todo muy bien, excepto porque esta imagen ondulatoria de la partícula clásica resulta incompatible con la propia mecánica cuántica. En efecto, es posible considerar un

paquete de ondas inicial con un ancho suficientemente pequeño, pero conforme evolucione de acuerdo con la ecuación de Schrödinger, el paquete generalmente se ensanchará abarcando regiones cada vez más extensas y la propiedad de localización se irá perdiendo con el tiempo. En otras palabras, el paquete inicial puede garantizar la condición (31.3), pero durante la evolución ésta pierde eventualmente su validez, y la correspondencia de  $\langle x \rangle_\psi$  con la posición de una partícula que describe la trayectoria clásica con momento  $\langle p \rangle_\psi$  tristemente llega a su fin. Después de todo, parece que nuestro paquete de ondas (o más en general la función de onda) no es tan apropiado para representar una única partícula viajera. . .

¿Qué representa entonces la función de onda? En este punto conviene recordar que la solución de la ecuación de Schrödinger solo nos permite conocer información estadística del sistema. Esto invita a considerar la posibilidad de que la función de onda no represente una partícula, sino un conjunto estadístico (también llamado *ensemble*) de ellas. En este escenario no habría razón para esperar que el límite clásico de la mecánica cuántica conduzca a las leyes de movimiento de *una* partícula clásica. De hecho, en el escenario clásico pero estadístico, es decir, cuando consideramos una distribución clásica  $P(x, p, t)$  que satisface la ecuación de Liouville<sup>1</sup>, se encuentran ecuaciones de movimiento para los valores medios de  $x$  y de  $p$  idénticas a (31.1) (aunque ahora referidas por supuesto a promedios calculados con la función  $P$ ) y no a (31.2); en particular, ocurre también que el centroide de una distribución de probabilidad clásica no necesariamente describe la trayectoria que corresponde a las ecuaciones (31.2).

Adoptando la interpretación de ensemble de la función de onda, la dispersión (o ensanchamiento) de los paquetes de onda conforme estos evolucionan no es más un problema. El paquete localizado representa una situación en la que todas las partículas del conjunto estadístico están ubicadas dentro de un intervalo estrecho. Por su parte —y en concordancia con las desigualdades de Heisenberg— la distribución de los valores del momento de dichas partículas es ancha, de tal forma que dentro del conjunto hay partículas con velocidades muy variadas; las más lentas se rezagarán y las más veloces se adelantarán, el conjunto abarcará una región más amplia del

<sup>1</sup>La ecuación de Liouville describe cómo fluye en el espacio fase la distribución de probabilidad (o la densidad de partículas)  $P(x, p, t)$  para un ensemble de partículas clásicas. Su forma explícita (en el caso unidimensional por simplicidad) es:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, p, t) = -\dot{x} \frac{\partial}{\partial x} P(x, p, t) - \dot{p} \frac{\partial}{\partial p} P(x, p, t).$$



espacio y el resultado es inmediato: al transcurrir el tiempo el paquete (no así cada partícula individual) deja de estar localizado.

La dispersión de los paquetes de onda no es la única razón para repensar críticamente la idea de que un paquete de ondas angosto es siempre una buena representación de una partícula clásica, y de que el Teorema de Ehrenfest, o bien las ecuaciones (31.1) aunadas a (31.3) deban identificarse con el límite clásico de las ecuaciones cuánticas. Una segunda razón para ello es que la condición (31.3) se cumple idénticamente, y para cualquiera que sea la función de onda, cuando el sistema está sujeto a una fuerza constante o lineal, como ocurre al considerar por ejemplo una carga inmersa en un campo eléctrico uniforme o un oscilador armónico. Los valores medios de la posición y del momento en estos casos evolucionan entonces siguiendo *exactamente* las ecuaciones clásicas, si bien los sistemas cuánticos exhiben propiedades que difieren dramáticamente de aquéllas correspondientes a su contraparte newtoniana (por ejemplo, las debidas a su naturaleza intrínsecamente dispersiva).

¿Qué significa entonces que un sistema cuántico siga leyes de evolución con idéntica estructura a las clásicas, o que para ensembles clásicos se obtengan ecuaciones de movimiento formalmente iguales a las obtenidas a partir de la ecuación de Schrödinger? Al final, parece que la mecánica cuántica nos desafía una vez más, no solo a asimilar sus conceptos sino también a definir y entender sus límites.

#### AGRADECIMIENTO

Este trabajo fue elaborado dentro del proyecto PAPIIT IN104816, financiado por la DGAPA-UNAM.

#### PARA SABER MÁS:

- Ballentine, L. E., *Quantum Mechanics. A modern development*, World Scientific, Singapur, 1998, 658 pp.
- Messiah, A., *Quantum Mechanics*, Dover, EUA, 1999, 1136 pp.
- Home, D., *Conceptual Foundations of Quantum Physics*, Plenum, EUA, 1997, 386 pp.
- de la Peña, L., *Introducción a la Mecánica Cuántica*, Fondo de Cultura Económica-UNAM, México, 2006, 964 pp.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

## PROBANDO ENTENDER LA MECÁNICA CUÁNTICA

*Luis de la Peña\**

Después de una breve revisión del estudio inicial de la mecánica cuántica se consideran algunos temas en los que se han manifestado desacuerdos de importancia. Se toma como representativo de estos temas la teoría de Bohm, como ejemplo concreto de la imposibilidad de construir una versión de la mecánica cuántica que sea a la vez determinista y local, y que respete las leyes cuánticas. En la sección final se seleccionan de entre la veintena de propuestas conocidas para complementar la teoría cuántica, dos que proponen agregar un elemento físico fundamental para darle contenido causal y determinista.

## UN FORMALISMO EXITOSO

Adentrarse en el mundo cuántico abre un panorama físico inmenso, más aún al dotarnos de herramientas matemáticas poderosas y efectivas para describir las características sorprendentes de los sistemas cuánticos. Una vez iniciado, el camino va abriéndose paso: la ecuación estacionaria de Schrödinger nos brinda las funciones de onda, que pronto descubrimos que son funciones propias del hamiltoniano. Normalizarlas a la unidad agrega la ventaja de enriquecer su significado, al permitirnos leerlas como amplitudes de probabilidad. Asociar las funciones de onda a vectores ortonormales, y en consecuencia a un espacio vectorial lineal —el llamado por los matemáticos espacio de Hilbert—, son pasos que para un estudiante de física despierto no requieren de esfuerzo mayor. Quizá lo que inicialmente resulta más problemático es comprender a fondo el hecho de que las variables dinámicas —los llamados observables— resultan representadas por

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

operadores. Surgen de inmediato sus conmutadores y el impacto profundo que sobre la dinámica se deriva de ellos.

Nos vamos separando cada vez más de cualquier descripción clásica: el mundo cuántico es un mundo en sí mismo y vamos entendiendo que requiere una descripción diferente, con sus propias herramientas. Más avanzamos, más se confirma esto. Por ejemplo, aparece el espín, que se describe con matrices, como representación de operadores. Esto nos hace recordar que la mecánica cuántica nació como mecánica matricial, y que fue con el tiempo y el desarrollo matemático de la teoría que se entendió que las matrices no eran sino una representación específica de los operadores asociados a las variables dinámicas. Pero la teoría también nació como mecánica ondulatoria. ¿Qué tiene que ver una con la otra, si pareciera tratarse de dos mundos aparte? Avanzando la oscuridad se disuelve cuando nos adentramos en la elegante teoría de representaciones, la que nos demuestra que ambas teorías, aparentemente distantes y desconectadas, no son sino dos descripciones diferentes de una misma teoría, dos visiones de un mundo cuántico único. Percibimos ahora la importancia de contar con un lenguaje cuántico apropiado: tan bien adaptado está el lenguaje de los kets y bras que se convierte en el natural para la escritura y el cálculo: simple, directo, efectivo.

Estamos ya inmersos en el espacio de Hilbert; es en él y no en el espacio-tiempo cotidiano en el que describimos cómo vive y se mueve el mundo cuántico. La descripción se ha vuelto muy abstracta, pero efectiva para nuestros propósitos. El lenguaje de Schrödinger y el de Heisenberg han quedado integrados en un esquema muy general y atractivo que pronto se aprende a manejar con fluidez. Con su uso y para nuestra sorpresa, descubrimos cómo es que, habiendo partido de postulados tan alejados de la física clásica, la forma de las ecuaciones que describen el movimiento cuántico coincide con la de las ecuaciones hamiltonianas clásicas. Son las mismas, pero sólo en su forma: la física es otra. Describen leyes que viven en mundos aparte: unas, las clásicas, en el mundo de funciones en el espacio-tiempo usual; las otras, en un universo de operadores que actúan en el espacio de Hilbert.

La no conmutatividad de los operadores nos conduce a uno de los más importantes teoremas de la teoría básica: sólo variables dinámicas que conmutan entre sí pueden tener valores bien definidos simultáneamente. La mayoría de las variables dinámicas, tienen entonces valores indefinidos, con variancias diferentes de cero. Es decir, fluctúan. Esto es precisamente lo que expresan las desigualdades de Heisenberg, conocidas indistintamente

como relaciones de incertidumbre o de indeterminación, aunque los significados sean diferentes. Recordamos que  $x$  y  $p$  no conmutan; luego la teoría no precisa simultáneamente el valor de ambas. Se dice entonces que no podemos hablar de trayectorias de los corpúsculos cuánticos. Y perdemos con ello lo poco que quedaba de la posibilidad de hacernos imágenes del mundo cuántico: éste se nos muestra no visualizable, dado a nosotros por su descripción formal en el espacio de Hilbert.

Prestemos atención a otras propiedades importantes de los sistemas cuánticos. Después del establecimiento por Planck y Bohr de los valores discretos de la energía de los sistemas cuánticos, la mayor revelación fue indudablemente la de sus propiedades ondulatorias por de Broglie, que sirviera de base para la construcción de la mecánica ondulatoria de Schrödinger, diseñada precisamente para describir estas propiedades. La linealidad de la ecuación de Schrödinger permite la superposición de sus soluciones y conduce con ello a la manifestación de los fenómenos de interferencia. En plazo breve los experimentos mostraron la generalidad de estos fenómenos, manifestados incluso por moléculas, y la dualidad onda-corpúsculo se convirtió pronto en el aspecto más característico y específico de los sistemas cuánticos. Paralelamente a esto, el descubrimiento del principio de incertidumbre por Heisenberg, llenó precisamente de incertidumbre a la física. En su formulación inicial, como principio, fue presentado como un resultado semi-cuantitativo del análisis de la perturbación que se ejerce sobre la partícula al medir, sea su posición o su momento. Esta perspectiva sigue siendo usual, particularmente en textos elementales o de divulgación. Se le interpreta así como una limitación inevitable asociada a una medición, como un impedimento que nos impone la Naturaleza. Pero bien visto, se trata de una propiedad asociada al aspecto ondulatorio del fenómeno cuántico, pues es un hecho que para todo fenómeno ondulatorio (esto incluye el sonido, etc.) existe una relación de esta naturaleza. Además, pronto se demostró que en el caso de la mecánica cuántica se trata de una propiedad de las varianzas de  $x$  y  $p$  asociadas a sus fluctuaciones. Resulta así que la limitación tiene sentido estadístico, y no es aplicable a una medición aislada. Con esto se gana en cuanto a interpretación del sentido de la limitación, pero la descripción resulta indeterminista. Surge así una nueva duda: ¿se trata de un indeterminismo a nivel descriptivo, epistémico?, o bien, ¿es un hecho ontológico, un fenómeno que se da en la Naturaleza? El hecho es que la teoría no contiene elemento alguno que de razón del indeterminismo ni resuelva la duda.

Hay otras muchas propiedades no menos interesantes de los sistemas

cuánticos; por ejemplo, el efecto túnel, el efecto laser, el entrelazamiento, etc., pero resulta oportuno prestar atención a algunos temas de más fondo.

#### LAS VARIAS LECTURAS DEL FORMALISMO CUÁNTICO

Regresemos a las desigualdades de Heisenberg. Vimos que su interpretación precisa se hace en términos de varianzas, lo que implica una descripción estadística, es decir, se tiene en mente un ensamble de sistemas equivalentes. Esto entra en contradicción con la noción, dominante en los libros de texto y de divulgación, de que la descripción cuántica —en particular la ofrecida por la ecuación de Schrödinger—, se refiere a una partícula. Es esta partícula única, por ejemplo, la que se difracta —dadas sus propiedades ondulatorias—, se dice. Es éste sólo el inicio de un mar de temas y dudas.

Si la ecuación de Schrödinger se refiere a una sola partícula, esa partícula es capaz de dividirse en dos partes (y a veces más) al cruzar una pantalla que tiene un par (o más) de rendijas, para más adelante interferir consigo misma, y manifestarse nuevamente como partícula, al incidir sobre la pantalla de detección. Además, tal partícula no siempre cumple con leyes deterministas, pues satisface invariablemente las desigualdades de Heisenberg.

Hay una segunda peculiaridad cuántica relacionada con lo anterior: la descripción resulta ser no local. Esto contrasta con el resto de la ciencia contemporánea; es sólo en cuentos, novelas de ciencia ficción y la magia donde se dan elementos no locales, como doblar una cuchara con la mente poderosa de Uri Geller. La relación entre el indeterminismo y la no localidad es el asunto central del importante teorema de Bell, pero dada la complejidad de tal tema seguiremos un camino más simple.

Como la función de onda es en general compleja, la escribimos en forma polar, como una amplitud y una fase,  $\psi = R \exp(iS)$ . La ecuación de Schrödinger determina las funciones reales  $R$  y  $S$  al separar las partes real e imaginaria. Uno de los resultados obtenidos coincide con la ecuación de Hamilton-Jakobi de la mecánica clásica, sólo que el potencial resultante es la suma del potencial clásico y un término adicional, que recibe el nombre de potencial cuántico; a esta suma se le conoce como potencial efectivo. Vista la teoría desde esta perspectiva, toda partícula cuántica está sujeta a la acción del potencial efectivo. Resulta sin embargo que el potencial cuántico tiene una estructura matemática no local. Un ejemplo simple de esto lo ofrece la dispersión de partículas por una barrera de potencial: se observa que ellas son desviadas de su trayectoria rectilínea antes de llegar a la barrera.

La representación polar de  $\psi$  apareció por vez primera en una analogía hidrodinámica de la mecánica cuántica publicada en 1932 por el físico alemán Erwin Madelung. Aunque ésta es meramente una alternativa formal, ella sugiere una imagen del origen de la no localidad cuántica: en un fluido es perfectamente natural que lo que sucede en  $x_1$  dependa de lo que pasa en cualquier otro punto  $x_2$ , pues la interacción la transmite el fluido que los conecta. El resultado es enteramente local si se toma en cuenta el fluido (modelado por la función de onda), pero resulta no local si no se le toma en cuenta. Una versión análoga de la mecánica cuántica fue usada por el físico estadounidense David Bohm en 1952 para darle sentido causal y determinista a esta teoría, como veremos a continuación.

El indeterminismo cuántico aparece cuando la teoría se interpreta como completa. Lo generalizado de esta interpretación durante la época de creación de la teoría se debió en primer lugar, a la estructura que la teoría iba adoptando conforme avanzaba, y en segundo lugar —pero de importancia definitiva— al hecho de que por entonces prevalecía en el ambiente científico una u otra versión de la corriente filosófica conocida como positivismo. En la época en que surgió esta filosofía (mediados del siglo XIX) significó un paso importante para el avance de la ciencia, pues su propósito declarado era colaborar al desarrollo de una visión científica del mundo, tanto natural como social; de ahí su nombre. Una característica definitoria del positivismo es que centra su atención en el conocimiento; esto, que parecería lo apropiado, a la larga desvió la atención de lo primario a lo secundario: considerar que la ciencia describe nuestro conocimiento del mundo (es decir, nuestra mente), en vez de que describe una fracción objetiva del mundo (que el realismo entiende como externo e independiente de nuestras teorías). Por ejemplo, Heisenberg en más de una ocasión escribió que la mecánica cuántica describe no al átomo, sino lo que sabemos del átomo. Un positivista asigna realidad sólo a lo que produce sensaciones, por ejemplo, lo que observa. De ahí aquella famosa pregunta de Einstein a un colega: “¿De verdad cree usted que la luna está ahí sólo si la observamos?”

Prácticamente todos los grandes fundadores de la mecánica cuántica —creada durante la segunda y tercera décadas del siglo XX— Bohr, Born, Dirac, Heisenberg, Pauli profesaban o aceptaban el positivismo, y lo utilizaron. La teoría quedó marcada por esta concepción, y así continúa, pese al hecho de que la filosofía la ha abandonado, pues se le considera contraria a la ciencia por su contenido de subjetividad.

Bohm, escapado de esta corriente, consideró como inaceptable el contenido indeterminista de la mecánica cuántica y buscó la manera de supe-

rarlo, sin violentarla. Su propuesta fue introducir la velocidad inicial de las partículas, la que, por ser enteramente libre, puede adquirir cualquier valor. Consideró que el (ahora aparente) indeterminismo es el resultado del valor arbitrario de esta velocidad: a una velocidad dada, corresponde una solución determinada. Es, pues, nuestra ignorancia del dato inicial lo que genera el indeterminismo aparente. La teoría adquiere con esto un carácter causal y determinista, sin verse afectada en el resto de sus predicciones. Aunque esta línea de razonamiento podría parecer interesante y constructiva, fue explícitamente rechazada por gran parte de la comunidad física. Una razón de ello fue la reinante convicción de Copenhague, y otra, aliada a la anterior, fue que el texto de 1935 de mecánica cuántica del notable matemático húngaro John von Neumann, incluía un teorema (que lleva su nombre) que establece la imposibilidad de construir una teoría de variables ocultas que restablezca el determinismo y que no viole la mecánica cuántica. Las variables ocultas son precisamente aquellas que se le agregan a la mecánica cuántica (como las velocidades iniciales de Bohm) para recuperar el determinismo.

Pero los recovecos de toda historia tienen su valor. Y muy importante en este caso. Bohm conocía el teorema de von Neumann, por lo que presentó su teoría como un contraejemplo al teorema: no teniendo argumentos matemáticos para demostrar la invalidez o inaplicabilidad del teorema, le bastaba un contraejemplo (y su teoría lo era) para demostrar que es posible construir teorías de variables ocultas consistentes por el resto con la propia teoría. La conclusión era que el teorema de von Neumann tenía alguna falla y no había razón para desestimar la teoría de Bohm. Sin embargo, ella permaneció en las sombras durante décadas y el indeterminismo continuó su reinado.

Sin embargo, resulta que en la teoría determinista de Bohm, la no localidad es central, pues el potencial cuántico —no local— juega un papel de primer plano. Luego la teoría es determinista, pero no local. En otras palabras: por corregir una insuficiencia se cae en otra. Bohm optó por aceptar la no localidad como necesaria e incluso construyó alrededor de ello una visión holística de la Naturaleza. La situación actual es cercana a su selección. En 1964 el físico norirlandés John Bell demostró que el teorema de von Neumann hace uso de un postulado inválido en general, lo que limita considerablemente su alcance. Hoy se sabe que es posible construir teorías de variables ocultas consistentes con la mecánica cuántica, siempre y cuando tales variables sean no-locales. La teoría de Bohm cae dentro de esta categoría.



La teoría de Bohm ha adquirido una amplia popularidad y existe un significativo número de textos dedicados a exponerla y desarrollarla. Paralelamente ha ido apareciendo una multitud de interpretaciones de la mecánica cuántica. Este fenómeno muestra que, mientras existe plena satisfacción con el aparato formal de la teoría, su interpretación física es causa de descontento en un sector cada vez mayor de físicos, algunos de quienes se aventuran a proponer una variante que les parece más satisfactoria. Podemos contar una veintena de teorías alternas en circulación, no todas consistentes entre sí. Se trata en todos los casos de propuestas firmes, la mayoría elaboradas por autores de primera línea, incluyendo premios Nobel. Este es el panorama que refleja el aserto de Feynman, en el sentido de que puede afirmar con certeza que nadie entiende la mecánica cuántica.

#### LA NATURALEZA ES MÁS RICA QUE NUESTRA DESCRIPCIÓN

Si el espacio lo permitiera, podríamos mencionar la variedad de teorías alternas que proponen alguna forma de completar o modificar la mecánica cuántica para superar lo que se percibe como una insuficiencia. Una conclusión general que se extrae de su estudio es que la teoría actual requiere ser completada. Lo que varía de autor a autor es la identificación de lo que se requiere para completarla. Basta ver la pluralidad de teorías de variables ocultas propuestas para apreciar la variedad de opiniones al respecto. Entre las alternativas conocidas, algunas pocas apuntan hacia lo que parece ser el núcleo del problema: la necesidad de introducir un elemento físico (ontológico) fundamental que ha quedado fuera de la teoría usual. Mencionaremos brevemente dos de estas alternativas. Una de ellas, desarrollada a lo largo de varios años, es la teoría propuesta en 2016 por el físico holandés (premio Nobel) Gerard 't Hooft, en la que se propone un mundo sub-cuántico clásico de autómatas celulares distribuidos al azar. Se trata de una teoría determinista de variables ocultas que conduce hacia la mecánica cuántica, e incluso va más allá hacia otras teorías de la física contemporánea.

La segunda alternativa es la electrodinámica estocástica. Más que una interpretación esta teoría constituye una fundamentación determinista, causal y local de la mecánica cuántica. En ella se introduce como elemento faltante al campo electromagnético del vacío, o campo de punto cero; éste es el campo de radiación que subsiste a la temperatura del cero absoluto y que permea todo el espacio. Se trata de un campo clásico (solución de las ecuaciones clásicas de Maxwell en el vacío), la magnitud de cuyas fluctuaciones y la energía de sus modos normales están determinadas por la cons-

tante de Planck, lo que exhibe a esta constante como medida universal de las fluctuaciones. La interacción de este campo con los electrones atómicos da lugar a un complejo y permanente comportamiento estocástico, reflejado en las desigualdades de Heisenberg. Años de exploración de esta teoría han permitido mostrar que en cierta aproximación la interacción materia-campo resulta suficiente para explicar el comportamiento cuántico, tanto de la materia como del propio campo de radiación. Un cálculo de mayor aproximación conduce correctamente al equivalente de la electrodinámica cuántica no relativista (no se ha explorado aún la versión relativista). Algunos ejemplos muestran la riqueza de esta teoría.

- La interacción con el campo de fondo suministra energía de manera aleatoria a los electrones atómicos, a la vez que, debido a su carga eléctrica en movimiento, radian. Las órbitas atómicas estacionarias se alcanzan cuando la energía media radiada y la absorbida por unidad de tiempo se compensan. Esto explica tanto la relativa estabilidad de estas órbitas como su naturaleza discreta.
- Consideremos un par de electrones que son parte de un sistema, pero que no hay un potencial de interacción entre ellos. Al considerar el campo de fondo común con el que ambas partículas interactúan, se revela un mecanismo que las conecta; esta interacción es particularmente intensa si las partículas son iguales, pues hay en tal caso modos comunes del campo, lo que conduce a la generación de una significativa correlación de algunas de sus variables (en analogía con el caso hidrodinámico). Esto es lo que se conoce como entrelazamiento. La mecánica cuántica introduce estas correlaciones al demandar que la función de onda sea antisimétrica, pero ello como un postulado, sin identificar la causa física que lo requiere (en la teoría cuántica de campos se argumenta, no de manera concluyente, sobre este asunto).
- En el ejemplo anterior el campo de fondo actuó como un generador de coherencia entre las partículas. Pero es aún más simple apreciarlo como un generador de incoherencia. En efecto, los electrones de un átomo pueden quedar sujetos al campo estocástico producido por otros átomos, totalmente ajenos unos a otros, lo que tiende a generar incoherencia en su comportamiento. Esto viene a ser parte del llamado ambiente incoherente que se postula en la mecánica cuántica y la teoría de la información, y que frecuentemente da lugar a efectos no deseados.

¿Qué podemos esperar del futuro? Dada la extendida inercia que defiende al status cuántico, no es de esperarse un cambio esencial en el tema en un plazo breve. Pero sí se puede prever cambios importantes en el curso de algunos años (¿o décadas?). El que parece de máxima importancia consistirá seguramente en agregar al aparato de la mecánica cuántica algún elemento *físico* hoy por hoy faltante —ontológico para ser más precisos— que, al completar su base física, habrá de conducir de manera natural a la resolución de sus mayores dificultades. En la sección anterior se han mencionado dos posibles ejemplos de tal posibilidad.

PARA SABER MÁS:

- Holland, P. R., *The Quantum Theory of Motion. An Account of the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1993, 598 pp.
- Bell, J. S., *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics*, Princeton University Press, Princeton, 1987.
- 't Hooft, G., *The Cellular Automaton Interpretation of Quantum Mechanics*, Fundamental Theories of Physics 185, Springer, Heidelberg, 2016, 298 pp.
- de la Peña, L., Cetto, M., Valdés Hernández, A., *The Emerging Quantum*, Springer, Berlín, 2015, 366 pp.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

## FOTONES ENREDADOS

Alfred B. U'Ren\*

En este capítulo presentamos un recorrido por los procesos no clásicos de óptica no lineal mediante los cuales es posible generar parejas y tripletes de fotones, así como estados brillantes de haces gemelos. Hablamos de la distinción entre procesos de segundo y de tercer orden, y presentamos los fundamentos de la teoría del proceso de conversión paramétrica descendente mediante el cual se generan parejas de fotones en cristales no lineales. Presentamos el concepto de enredamiento cuántico en sistemas compuestos, presentando algunos de los comportamientos poco intuitivos derivados de las propiedades de sistemas cuánticos, y mencionamos algunas de las aplicaciones posibles.

## ÓPTICA NO LINEAL Y PROCESOS NO LINEALES DE SEGUNDO ORDEN

En la óptica no lineal se presenta una gama considerable de procesos de *conversión de frecuencias*, es decir donde una o más ondas inciden en un medio ópticamente no lineal, y donde se generan nuevas ondas con frecuencias diferentes a las incidentes. La óptica no lineal se encuentra fundamentada en una respuesta no lineal de un medio material a un campo electromagnético externo. En particular, el momento dipolar por unidad de volumen  $P$  se encuentra descrito en la óptica no lineal por una serie de potencias del campo eléctrico  $E$  como sigue

$$P = \epsilon_0 \left( \chi^{(1)} E + \chi^{(2)} E^2 + \chi^{(3)} E^3 + \dots \right), \quad (33.1)$$

donde por simplicidad aquí hemos ignorado el aspecto tensorial de los coeficientes de la serie de potencias. El primer término corresponde a la óptica lineal y los términos de orden superior a la óptica no lineal. En general,

---

\*Departamento de Estructura de la Materia, Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México.

considerando que para materiales ópticos realistas los valores de  $\chi^{(2)}$  y  $\chi^{(3)}$  son pequeños, se requieren intensidades considerables para estar en posibilidades de observar efectos no lineales [1]. En la práctica este tipo de intensidades se consiguen rutinariamente mediante el uso de láseres.

Dependiendo del coeficiente que resulte dominante,  $\chi^{(2)}$  ó  $\chi^{(3)}$ , se presentan efectos basados en la óptica no lineal de segundo orden ó en la óptica no lineal de tercer orden, respectivamente. En general los procesos de segundo orden involucran a tres ondas y son conocidos colectivamente como “mezcla de tres ondas”, y los de tercer orden involucran a cuatro ondas y son conocidos como “mezcla de cuatro ondas”.

Es importante hacer notar que existen procesos de óptica no lineal *clásicos*, es decir que pueden ser descritos mediante el electromagnetismo de Maxwell. Existen otros procesos no lineales que son de *naturaleza cuántica*, y que requieren de forma fundamental de la mecánica cuántica para su descripción correcta. En este capítulo nos enfocaremos en la segunda categoría: en los procesos no lineales que son de origen no clásico, es decir cuántico.

A lo largo de este escrito les llamaremos a las tres ondas de un proceso de mezclado de tres ondas bombeo, señal, y acompañante (abreviadas  $p$ ,  $s$ ,  $i$  por sus iniciales en inglés). El Hamiltoniano que describe a estos procesos se escribe como sigue

$$\hat{H} = i\kappa\hat{a}_p\hat{a}_s^\dagger\hat{a}_i^\dagger - i\kappa^*\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_s\hat{a}_i, \quad (33.2)$$

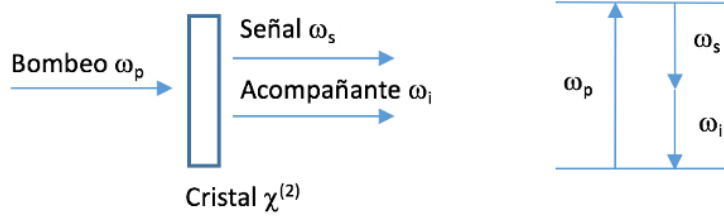
donde  $\kappa$  es una constante, y donde  $\hat{a}_p$  ( $\hat{a}_s$ ,  $\hat{a}_i$ ) es el operador de aniquilación del bombeo (señal, acompañante). Supongamos que inicialmente el bombeo se describe correctamente por un estado coherente, el cual representa esencialmente una onda clásica ( $|\alpha\rangle_p$ ), y las ondas señal y acompañante por el estado del vacío. Es decir, escribimos el estado inicial como sigue

$$|\Psi(0)\rangle = |\alpha\rangle_p|0\rangle_s|0\rangle_i. \quad (33.3)$$

Al tiempo  $t$ , el estado se escribe de la siguiente forma, de acuerdo a la evolución Hamiltoniana

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}t\right)|\Psi(0)\rangle. \quad (33.4)$$

Consideremos dos casos importantes. El primero es el llamado *régimen espontáneo*, que se da cuando la interacción es débil y podemos utilizar teoría de perturbaciones de primer orden, obteniendo



**Figura 33.1:** Diagrama mostrando (izquierda) las ondas de entrada y salida, participantes en el proceso SPDC. En la derecha se muestra un correspondiente diagrama de energías.

$$|\Psi(t)\rangle \approx \left( \hat{1} + \frac{1}{i\hbar} \hat{H}t \right) |\Psi(0)\rangle. \quad (33.5)$$

Podemos re-escribir el estado final  $|\Psi\rangle$  en términos de un tiempo adimensional  $\xi = t\alpha\kappa/\hbar$  (en el caso espontáneo de interés aquí se cumple  $|\xi| \ll 1$ ) como sigue

$$|\Psi\rangle = |\alpha\rangle_p |\Psi\rangle_{si} = |\alpha\rangle_p (|0\rangle_s |0\rangle_i + \xi |1\rangle_s |1\rangle_i), \quad (33.6)$$

donde hemos usado la propiedad  $a_p|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ . La ecuación (33.6) nos dice que el estado final para las ondas señal y acompañante  $|\Psi\rangle_{si}$  se compone mayoritariamente del vacío con una pequeña contribución (con probabilidad  $|\xi|^2/(1+|\xi|^2) \approx |\xi|^2$ ) de parejas de fotones  $|1\rangle_s |1\rangle_i$ . La probabilidad de emisión  $|\xi|^2$  resulta ser proporcional a la potencia del bombeo y al coeficiente no lineal elevado al cuadrado,  $(\chi^{(2)})^2$ . Al proceso de aniquilación de un fotón de bombeo seguido de la creación de una pareja de fotones señal y acompañante, mediado por una no linealidad de segundo orden, que hemos descrito aquí se le conoce como *conversión paramétrica descendente* (SPDC, por sus siglas en inglés) [2].

El segundo caso que consideraremos es cuando la interacción deja de ser débil y no podemos utilizar teoría de perturbaciones. En este caso, podemos mostrar que, al mantener la exponencial completa en la ecuación (33.4), el estado final queda expresado de la siguiente forma, con la definición  $\lambda \equiv \tanh|\xi|$  y en términos de los estados de número  $|n\rangle$  en cada uno de los modos de generación

$$|\Psi\rangle = |\alpha\rangle_p \sqrt{1-\lambda^2} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n |n\rangle_s |n\rangle_i. \quad (33.7)$$

Vale la pena comentar varios aspectos interesantes de este resultado. En primer lugar, el caso límite  $|\xi| \ll 1$  representa el régimen espontáneo (ver ecuación (33.6)), en el que se generan parejas de fotones. En segundo lugar, resulta evidente de la ecuación (33.7) que la emisión se presenta en números pares de fotones con una amplitud decreciente. En tercer lugar, aparecen correlaciones estrictas de número de fotón: si se determina que la onda señal contiene  $n$  fotones sabremos que la onda acompañante contiene similarmente  $n$  fotones. A este tipo de correlaciones cuánticas que no tienen contraparte en la física clásica se les denomina *enredamiento cuántico*, del cual se hablará más en este capítulo. A la luz representada por el estado en la ecuación (33.7) se le denomina *luz comprimida de dos modos* o *haces gemelos* [3]. Aunque no nos ocuparemos de describir en mayor detalle este tipo de estados, mencionamos que la *compresión* se refiere a una reducción del ruido (fluctuaciones del vacío) por debajo del llamado *límite cuántico estándar* en una de las cuadraturas (junto con un incremento en la misma proporción en la otra cuadratura), con aplicaciones interesantes en mediciones interferométricas de precisión (por ejemplo en el contexto de la reciente observación de ondas gravitacionales en LIGO [4]).

Nótese que cuando el estado inicial de las ondas señal y acompañante es el vacío, es decir  $|0\rangle_s|0\rangle_i$ , el segundo término del Hamiltoniano (ver ecuación (33.2)) no contribuye, ya que  $\hat{a}_s|0\rangle_s = \hat{a}_i|0\rangle_i = 0$ . Sin embargo, volviendo al caso espontáneo, si el estado inicial para los fotones señal y acompañante fuese  $|1\rangle_s|1\rangle_i$ , entonces este segundo término describiría al proceso inverso al SPDC, es decir la aniquilación de los fotones señal y acompañante, seguida de la creación de un fotón de bombeo. Evidentemente para que este proceso pueda darse, es indispensable contar con fotones señal y acompañante previamente generados (por ejemplo a través del proceso SPDC). A este proceso de naturaleza cuántica se le conoce como *conversión ascendente* o *suma de frecuencias* [5].

Otra posibilidad es contar inicialmente con estados coherentes  $|\alpha_s\rangle$  y  $|\alpha_i\rangle$  para las ondas señal y acompañante, en lugar de estados de número  $|1\rangle_s$  y  $|1\rangle_i$ . Bajo estas condiciones, siempre y cuando se conserven energía y momento lineal, se presenta el proceso de suma de frecuencias, donde se genera una tercera onda con frecuencia  $\omega_s + \omega_i$ . A diferencia del proceso descrito en el párrafo anterior (también llamado suma de frecuencias) con estados de número de entrada, el proceso aquí descrito se encuentra fuera del régimen espontáneo y es de naturaleza clásica, se puede estudiar enteramente en el contexto del electromagnetismo de Maxwell. Al caso degenerado con las dos ondas incidentes en la misma frecuencia ( $\omega \equiv \omega_s = \omega_i$ )



se le conoce como proceso de *generación de segundo armónico*, y resulta en la generación de una nueva onda con frecuencia  $2\omega$  [6]. De este modo, la versión cuántica del proceso de suma de frecuencias se obtiene en el caso límite cuando las ondas señal y acompañante incidentes contienen un único fotón.

Existe una tercera variante, de naturaleza cuántica, del proceso de suma de frecuencias que se presenta cuando se hace incidir un fotón individual por ejemplo en el modo señal  $|\omega_s\rangle$  junto con un estado coherente  $|\alpha_i\rangle$  para el modo acompañante. Bajo estas condiciones, y manteniendo conservación de energía y momento lineal, es posible lograr la *traslación espectral óptica* del fotón incidente  $|\omega_s\rangle$  a la frecuencia  $|\omega_s + \omega_i\rangle$ , es decir se logra un corrimiento espectral al nivel de un solo fotón [7].

#### DESCRIPCIÓN MULTIMODAL DE PROCESOS NO LINEALES

Volviendo al proceso de SPDC, la descripción que hemos presentado hasta ahora representa una simplificación importante en el sentido de que cada una de las ondas bombeo, señal, y acompañante, se compone de un único modo óptico. En una situación realista al describir cada una de estas tres ondas deberemos de considerar todos los grados de libertad fotónicos disponibles incluyendo: frecuencia-tiempo, momento-posición transversal, y polarización. Representamos por  $\vec{X}_s$  los grados de libertad para el fotón señal, y por  $\vec{X}_i$  los grados de libertad para el fotón acompañante. En este caso el estado  $|\Psi\rangle_{si}$  se compone de la suma coherente de múltiples contribuciones para cada combinación  $\vec{X}_s, \vec{X}_i$ , cada contribución con un valor distinto de  $\xi$  resultando en una superposición lineal como sigue [8]

$$|\Psi\rangle_{si} = |0\rangle_s |0\rangle_i + \int d\vec{X}_s \int d\vec{X}_i f(\vec{X}_s, \vec{X}_i) |\vec{X}_s\rangle_s |\vec{X}_i\rangle_i. \quad (33.8)$$

En esta última ecuación, denominamos a  $f(\vec{X}_s, \vec{X}_i)$  como amplitud conjunta; hemos definido  $|\vec{X}_s\rangle_s \equiv \hat{a}^\dagger(\vec{X}_s)|0\rangle_s$  y  $|\vec{X}_i\rangle_i \equiv \hat{a}^\dagger(\vec{X}_i)|0\rangle_i$ . Nótese que en esta descripción cada  $\vec{X}_s$  y  $\vec{X}_i$  conlleva a un operador de aniquilación, y por lo tanto a un modo óptico diferenciable del resto. Nótese también que para el caso de grados de libertad discretos (e.g. polarización),  $\vec{X}_s$  y  $\vec{X}_i$  toman valores discretos y la integral de la ecuación (33.8) se transforma en una suma. Vale la pena mencionar que aunque los grados de libertad de frecuencia-tiempo y momento-posición son continuos es posible en ciertas circunstancias trabajar con versiones discretizadas de estos últimos.

En particular, en el caso de frecuencia-tiempo, es posible utilizar ventanas temporales (*time bins*) como un grado de libertad discreto [9]. En el caso de posición-momento transversal, al emplear familias de modos transversales con momento angular orbital (OAM), es posible utilizar este último como grado de libertad discreto [10].

La función  $|f(\vec{X}_s, \vec{X}_i)|^2$ , o la intensidad conjunta, representa la distribución de probabilidad de emisión de pares de fotones en las variables  $\vec{X}_s$  y  $\vec{X}_i$ . En general, esta función tendrá valores distintos a 0 para aquellas combinaciones de  $\vec{X}_s$  y  $\vec{X}_i$  que cumplan la conservación de energía además de la siguiente condición de empatamiento de fases, equivalente a conservación de momento,

$$|k_{pz} - k_{sz}(\vec{X}_s, \vec{X}_i) - k_{iz}(\vec{X}_s, \vec{X}_i)| \leq \frac{\pi}{L}, \quad (33.9)$$

donde  $k_{pz}$ ,  $k_{sz}$ , y  $k_{iz}$  representan las componentes Cartesianas  $z$  de los vectores de onda de cada una de las tres ondas bombeo, señal y acompañante, y donde  $L$  es la longitud del medio no lineal. Nótese que únicamente en el caso  $L \rightarrow \infty$  (que implica invarianza traslacional) se conserva el momento lineal de forma exacta.

#### ENREDAMIENTO CUÁNTICO

Una de las propiedades más interesantes de los sistemas multi-partitos cuánticos es la posible aparición de enredamiento cuántico. Las fuentes de parejas de fotones que hemos presentado constituyen de forma natural un sistema enredado, como describiremos a continuación.

En general, un sistema cuántico compuesto de dos o más subsistemas se dice enredado si su estado *no* se puede escribir como el producto directo de estados que describan a cada uno de los subsistemas. Un estado de pares de fotones se encuentra enredado si la función  $f(\vec{X}_s, \vec{X}_i)$  no se puede expresar como un producto de funciones  $S(\vec{X}_s)I(\vec{X}_i)$ . El enredamiento se puede presentar en cualquiera de los grados de libertad fotónicos como tiempo-frecuencia, posición-momento transversal, polarización, y número de fotones.

El enredamiento cuántico ha generado un enorme interés desde un famoso artículo publicado en 1935 por Einstein, Podolsky, y Rosen (EPR) [11]. Fundamentalmente, EPR argumentaron que cualquier teoría física tendría que cumplir con dos conceptos: *localidad* (una acción en un punto no puede tener un efecto instantáneo en otro punto distante) y *realismo* (un sistema

se encuentra en un estado definido independientemente de si decidimos observarlo).

Consideremos el estado  $|\Psi_{-}\rangle = 2^{-1/2}(|H\rangle_1|V\rangle_2 - |V\rangle_1|H\rangle_2)$  donde  $H$  y  $V$  denotan las polarizaciones horizontal y vertical, y los subíndices 1 y 2 representan dos subsistemas, i. e. en nuestro caso los fotones señal y acompañante. Este estado se encuentra enredado ya que no se puede factorizar en un estado para cada subsistema. Ahora bien, supongamos que el fotón señal es recibido por un usuario Alice y el acompañante por otro usuario Bob. En aquellos casos cuando tanto Alice como Bob registran un fotón de una pareja emitida, al medir Alice la polarización de su fotón puede predecir el resultado de Bob, aún considerando que cada fotón por sí sólo tiene una polarización indefinida, y que Alice y Bob podrían estar arbitrariamente separados. ¡Se violan tanto la localidad como el realismo! EPR argumentaron que el conflicto entre la mecánica cuántica, por un lado, y la localidad y realismo por otro lado, implicaban que la primera es una teoría incompleta y que tendría que ser remplazada por una teoría más completa.

En un esfuerzo por avanzar hacia una resolución basada en mediciones experimentales de la discrepancia entre la mecánica cuántica y los conceptos de realismo y localidad, se han desarrollado las llamadas *desigualdades de Bell* [12]. Se trata de suponer que existen llamadas *variables ocultas* (cuya naturaleza desconocemos) que son responsables del aparente *spooky action at a distance* (acción fantasmal a distancia) que implica la existencia del enredamiento cuántico. Las desigualdades de Bell identifican regímenes experimentales en los que, al violarse las desigualdades, es imposible que exista una teoría de variables ocultas locales que describa las correlaciones observadas. En la década de los ochenta se realizaron múltiples experimentos que dejaron claro que las predicciones de la mecánica cuántica son correctas, y por lo tanto que los conceptos de realismo y localidad de EPR no se respetan universalmente.

Aunque en un inicio la óptica cuántica experimental se desarrolló alrededor de la necesidad de validar la mecánica cuántica, una vez que se aceptaron como verdaderas las propiedades poco intuitivas del mundo cuántico el énfasis pasó al aprovechamiento en nuevas aplicaciones. La tecnología cuántica con mayor nivel de desarrollo es la *distribución de llaves cuánticas* que aprovecha las propiedades cuánticas para lograr comunicaciones seguras, en las que la seguridad está garantizada por las leyes de la física [13]. En la llamada *computación cuántica* se han desarrollado diversos algoritmos que permiten realizar tareas tales como factorización en factores primos o búsquedas en bases de datos de forma más eficiente de lo que permite la

física clásica. Es posible que en las próximas décadas se presente una revolución tecnológica al aprovechar las propiedades cuánticas de los sistemas físicos [14].

#### PROCESOS NO LINEALES SEMILLADOS

Volviendo al SPDC, es un proceso en el que se ilumina el medio no lineal con una única onda clásica, es decir con el bombeo. ¿Que sucede si adicionamos una segunda onda clásica? Se puede demostrar que si se inyecta una onda con frecuencia  $\omega_s$  (además del bombeo con frecuencia  $\omega_p$ ), se presenta la generación de una tercera onda en la frecuencia  $\omega_i = \omega_p - \omega_s$  siempre y cuando se cumpla el emparejamiento de fases  $\vec{k}_p - \vec{k}_s - \vec{k}_i \approx 0$ . A este proceso se le llama *amplificación paramétrica óptica*, ya que a la par de la generación de la tercera onda, se amplifica la onda señal también conocida como semilla, en la frecuencia  $\omega_s$  (donde el subíndice s denota el modo señal que actúa como semilla). Un nombre alternativo para este proceso es *generación de diferencia de frecuencias*, nombre que se emplea en aquellos casos en los que el énfasis es sobre la generación de la tercera onda.

En el caso espontáneo en el que el medio no lineal se ilumina con una sola onda clásica, una interpretación válida es que a pesar de no existir la onda semilla aún ocurre el proceso de amplificación paramétrica óptica, aunque con los fotones virtuales resultantes de las fluctuaciones del vacío actuando como semilla. Es decir, se trata de la “amplificación” de fotones virtuales convirtiéndolos en fotones medibles. Ya que las fluctuaciones del vacío representan un fenómeno netamente cuántico, este proceso no tiene contraparte en la física clásica. El SPDC representa el caso límite de la amplificación paramétrica óptica cuando la potencia del modo semilla se vuelve cero.

#### PROCESOS NO LINEALES DE TERCER ORDEN

Hasta ahora hemos descrito los procesos de mezcla de tres ondas derivados de la óptica no lineal de segundo orden. Existe una familia similar de procesos de mezcla de cuatro ondas derivados de la óptica no lineal de tercer orden. Mientras que las no linealidades de orden par, incluyendo de segundo orden, requieren de una no-centrosimetría en el medio no lineal, las de orden impar, incluyendo de tercer orden, pueden ocurrir en medios amorfos. Para efectos  $\chi^{(2)}$  se utilizan generalmente cristales no lineales con anisotropías ópticas. Aunque en principio para  $\chi^{(3)}$  existe una muy consi-

derable libertad de elección del material no lineal, en la práctica con frecuencia se utilizan las fibras ópticas (o guías de onda), por la conveniencia de contar con modos ópticos confinados.

Una generalización directa del proceso SPDC (un efecto  $\chi^{(2)}$ ) es la *conversión paramétrica descendente de tercer orden* (TOSPDC) que ocurre en medios  $\chi^{(3)}$ . En este proceso, un fotón de un modo de bombeo se aniquila resultando en la generación de tripletes (en lugar de parejas) de fotones [15]. El proceso inverso, en el que tres fotones (con frecuencias  $\omega_r$ ,  $\omega_s$ , y  $\omega_i$ ) son aniquilados para generar un fotón con frecuencia  $\omega_r + \omega_s + \omega_i$  es la *conversión ascendente de tercer orden, o suma de frecuencias*. Cabe señalar que a diferencia del SPDC, resulta un reto fuerte lograr el empatamiento de fases  $k_p = k_r + k_s + k_i$  por lo que a la fecha no se reportan experimentos convincentes ni de generación de tripletes mediante TOSPDC, ni de conversión ascendente de tercer orden. Nótese que si se hacen incidir estados coherentes  $|\alpha_r\rangle_r$ ,  $|\alpha_s\rangle_s$  y  $|\alpha_i\rangle_i$  en lugar de fotones individuales se obtiene el proceso clásico de suma de frecuencias que en el caso degenerado  $\omega_r = \omega_s = \omega_i$  se le conoce como *generación de tercer armónico*.

Al contar con cuatro ondas en lugar de tres, la familia de procesos cuánticos  $\chi^{(3)}$  es más rica. Una posibilidad es utilizar dos bombeos, i. e. ondas clásicas, en lugar de uno sólo, lo cual resulta en la aniquilación de dos fotones de bombeo para dar lugar a la generación de una pareja de fotones señal-acompañante. Este proceso ha sido estudiado experimentalmente por más de 15 años, y es conocido como *mezcla de cuatro ondas espontánea* (SFWM) [16]. El SFWM exhibe algunas ventajas importantes como plataforma para generación de parejas de fotones sobre el SPDC incluyendo una longitud esencialmente ilimitada de interacción así como compatibilidad con las redes de fibra óptica instaladas.

Partiendo ya sea de TOSPDC o de SFWM es posible tener procesos semillados (de amplificación paramétrica óptica). Tomando como base el proceso de TOSPDC es posible utilizar un esquema de una única semilla para estimular la generación en los dos modos restantes, o un esquema de semillado doble (en dos de los tres modos de generación TOSPDC) para estimular la generación en el modo restante. Tomando como base el proceso de SFWM, se puede utilizar una semilla en uno de los dos modos de generación para estimular la generación en el modo restante. Nótese que al utilizar una semilla sintonizable con ancho de línea angosto, y al medir el espectro de emisión del modo estimulado como función de la frecuencia de la semilla, es posible lograr una caracterización espectral de proceso SFWM[17].

## CONCLUSIONES

En este capítulo hemos realizado un recorrido guiado por los procesos cuánticos de óptica no lineal, tanto de segundo como de tercer orden. Hemos mostrado un esbozo de la teoría detrás de la conversión paramétrica descendente, y hemos discutido tanto el caso espontáneo de generación de parejas de fotones como el caso de mayor ganancia paramétrica en el que se generan superposiciones de numeros pares de fotones. Hemos presentado una perspectiva histórica de la óptica cuántica experimental, desde la violación de desigualdes de Bell hasta aplicaciones como distribución de llaves cuánticas y computación cuántica. Esperamos que este capítulo haya estimulado el deseo en el lector de aprender más sobre el interesante mundo de la óptica cuántica y los procesos de generación de fotones.

## REFERENCIAS

- [1] R. W. Boyd, *Nonlinear optics*. San Diego, CA: Academic Press, 2003.
- [2] D. C. Burnham y D. L. Weinberg, «Observation of Simultaneity in Parametric Production of Optical Photon Pairs», *Physical Review Letters*, vol. 25, n.º 2, págs. 84-87, jul. de 1970.
- [3] L.-A. Wu, H. J. Kimble, J. L. Hall y H. Wu, «Generation of Squeezed States by Parametric Down Conversion», *Physical Review Letters*, vol. 57, n.º 20, págs. 2520-2523, nov. de 1986.
- [4] J. Aasi, J. Abadie, B. P. Abbott y col., «Enhanced sensitivity of the LIGO gravitational wave detector by using squeezed states of light», *Nature Photonics*, vol. 7, n.º 8, págs. 613-619, ago. de 2013.
- [5] K. A. O'Donnell y A. B. U'Ren, «Time-Resolved Up-Conversion of Entangled Photon Pairs», *Physical Review Letters*, vol. 103, n.º 12, pág. 123 602, sep. de 2009.
- [6] P. A. Franken, A. E. Hill, C. W. Peters y G. Weinreich, «Generation of Optical Harmonics», *Physical Review Letters*, vol. 7, n.º 4, págs. 118-119, ago. de 1961.
- [7] A. P. VanDevender y P. G. Kwiat, «Quantum transduction via frequency upconversion (Invited)», *JOSA B*, vol. 24, n.º 2, págs. 295-299, feb. de 2007.

- 
- [8] A. B. U'Ren, K. Banaszek e I. A. Walmsley, «Photon engineering for quantum information processing», *Quantum Information & Computation*, vol. 3, n.º 7, págs. 480-502, oct. de 2003.
- [9] I. Marcikic, H. de Riedmatten, W. Tittel y col., «Time-bin entangled qubits for quantum communication created by femtosecond pulses», *Physical Review A*, vol. 66, n.º 6, pág. 062 308, dic. de 2002.
- [10] A. Mair, A. Vaziri, G. Weihs y A. Zeilinger, «Entanglement of the orbital angular momentum states of photons», *Nature*, vol. 412, n.º 6844, págs. 313-316, jul. de 2001.
- [11] A. Einstein, B. Podolsky y N. Rosen, «Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?», *Physical Review*, vol. 47, n.º 10, págs. 777-780, mayo de 1935.
- [12] J. S. Bell, «On the Einstein Podolsky Rosen paradox», *Physica Physique Fizika*, vol. 1, n.º 3, págs. 195-200, nov. de 1964.
- [13] N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel y H. Zbinden, «Quantum cryptography», *Reviews of Modern Physics*, vol. 74, n.º 1, págs. 145-195, mar. de 2002.
- [14] P. Kok, W. J. Munro, K. Nemoto y col., «Linear optical quantum computing with photonic qubits», *Reviews of Modern Physics*, vol. 79, n.º 1, págs. 135-174, ene. de 2007.
- [15] M. Corona, K. Garay-Palmett y A. B. U'Ren, «Experimental proposal for the generation of entangled photon triplets by third-order spontaneous parametric downconversion in optical fibers», *Optics Letters*, vol. 36, n.º 2, págs. 190-192, ene. de 2011.
- [16] M. Fiorentino, P. Voss, J. Sharping y P. Kumar, «All-fiber photon-pair source for quantum communications», *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 14, n.º 7, págs. 983-985, jul. de 2002, Conference Name: IEEE Photonics Technology Letters.
- [17] B. Fang, O. Cohen, M. Liscidini y col., «Fast and highly resolved capture of the joint spectral density of photon pairs», *Optica*, vol. 1, n.º 5, págs. 281-284, nov. de 2014.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙



## CORRELACIONES CUÁNTICAS

*Rocío Jáuregui\**

**El objetivo de este capítulo es introducir el concepto de correlaciones cuánticas y resaltar su relevancia tanto en fenómenos directamente observados en la vida cotidiana, como en dispositivos contruidos para realizar tareas específicas.**

Física es un término que proviene del griego phisis y que significa “realidad” o “naturaleza”. Los físicos desarrollan modelos para describir los fenómenos naturales que son caracterizados por mediciones de las diversas propiedades de los sistemas en que estos fenómenos se presentan. Si el sistema de interés está formado por subsistemas, suele ocurrir que alguna propiedad de un subsistema no es independiente de las propiedades de otro subsistema. Se dice entonces que los subsistemas están correlacionados. Si la descripción de estas correlaciones se puede hacer dentro de un modelo basado en las leyes que establece la física clásica (cuántica) se habla de correlaciones clásicas (cuánticas).

Nuestra intuición física se construye en términos de nuestras observaciones cotidianas y suele decirse que éstas, en su mayoría, competen a la física clásica. Sin embargo, las correlaciones cuánticas son clave para la comprensión de muchos fenómenos que observamos diariamente. Por ejemplo, al mirar con atención el comportamiento general de los elementos que constituyen a la materia se construyó la tabla periódica. El modelaje exitoso de los átomos agrupados en esta tabla se realiza en términos de electrones interaccionando entre sí y con el núcleo atómico dentro del contexto de la mecánica cuántica. El núcleo y cada electrón pueden considerarse subsistemas del átomo. La estructura de la interacción electromagnética entre estos

---

\*Departamento de Física Cuántica y Fotónica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

subsistemas guarda muchas semejanzas en los modelos clásicos y cuánticos, sin embargo, existe una correlación entre los electrones de origen plenamente cuántico que se expresa en el principio de exclusión de Pauli. De acuerdo con este principio cualquier función de onda que se utilice para describir a un conjunto de electrones deberá cambiar de signo ante el intercambio de los grados de libertad electrónicos. Este principio va más allá de la física atómica ya que se debe aplicar tanto si los electrones forman un gas, o están en átomos aislados, moléculas o conglomerados de moléculas. Para modelar al átomo de helio (dos electrones de grados de libertad denotados de manera compacta como 1 y 2, y un núcleo con grados de libertad  $a$ ), el principio de exclusión implica que  $\psi(1, 2; a) = -\psi(2, 1; a)$ . En la aproximación de campo medio, despreciando efectos magnéticos núcleo-electrón y recordando que el núcleo es muy pesado se escribe la función modelo más sencilla para este átomo,  $\psi(1, 2; a) = \Psi(a)\Phi(1, 2)$  con

$$\Phi(1, 2) = \phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) - \phi_\beta(1)\phi_\alpha(2).$$

Nótese que la estructura de la función de onda del átomo es tal que el estado del núcleo se aproxima como independiente del de los electrones. Mientras que el estado de estos últimos es dado por  $\Phi(1, 2)$ . Se observa además que NO existen  $\tilde{\phi}_{\alpha'}$  y  $\tilde{\phi}_{\beta'}$  tales que

$$\Phi(1, 2) = \tilde{\phi}_{\alpha'}(1)\tilde{\phi}_{\beta'}(2),$$

y las propiedades de cada electrón en un átomo NO pueden describirse como independientes de las propiedades de cualquier otro electrón en ese átomo. Este es un ejemplo de una correlación cuántica conocida como entrelazamiento. El entrelazamiento por simetría de intercambio afecta de forma visible el comportamiento de la materia a todas las escalas.

La física cuántica induce correlaciones sin análogo clásico, no sólo en términos de los entes que se utilizan para describir estados específicos de la radiación y de la materia, sino también de los objetos matemáticos que se usan para representar a las propiedades dinámicas y probabilísticas de ambos. Así, mientras que en el contexto clásico la posición  $\vec{r}$  y el momento cinético  $\vec{p}$  de una partícula se consideran propiedades mecánicas independientes, en el contexto cuántico los operadores que las representan no conmutan y, en consecuencia, la desviación estándar de estas variables físicas satisface relaciones de incertidumbre: para cada componente cartesiana  $i$  de la posición y momento  $\Delta r_i \Delta p_i \geq \hbar/2$ ; la constante de Planck  $\hbar = 1.0545718 \times 10^{-34} \text{ kg} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$  tiene un valor pequeño en la escala macroscó-

pica, propiedad relevante al tratar de entender la compatibilidad de las observaciones clásicas como límite asintótico de sus análogos cuánticos. También y de manera semejante, para cualquier estado de la luz las oscilaciones de los campos eléctrico y magnético satisfacen relaciones de incertidumbre. Por ejemplo, dada una onda electromagnética monocromática plana que se propaga en la dirección  $z$  y está polarizada en la dirección  $x$  el operador de campo eléctrico se escribe

$$\hat{E}_x(z, t) = 2\mathcal{E}_0 \text{sen}(kz)(\hat{\Lambda}_1 \cos \omega t + \hat{\Lambda}_2 \text{sen} \omega t),$$

con  $\hat{\Lambda}_{1,2}$  operadores hermitianos conocidos como cuadraturas. Estos operadores no conmutan de tal suerte que las incertidumbres intrínsecas satisfacen la relación  $\Delta\Lambda_1\Delta\Lambda_2 \geq 1/4$ . En todos estos ejemplos la variable dinámica de interés puede asumir valores dentro de un espectro continuo. Tal no es el caso de las componentes del vector espín del electrón. En este caso el espectro es discreto con solo dos opciones  $\pm 1/2\hbar$ , es decir, los estados asociados al espín electrónico son realizaciones del llamado “qubit”. La incertidumbre intrínseca asociada a las mediciones de dos de las proyecciones de espín está condicionada al valor medio de la tercera,

$$\Delta S_x \Delta S_y \geq \hbar/2 < S_z > .$$

Hay que recordar que estos valores promedio y desviaciones estándar reflejan la naturaleza probabilística de la descripción cuántica y, por lo general, son adicionales a fuentes de incertidumbre derivadas de la implementación experimental específica para medir una propiedad física.

La combinación de la estructura de las variables dinámicas en el contexto cuántico, con la posibilidad de tener estados entrelazados da origen a fenómenos observados en la naturaleza que suelen evadir nuestra intuición clásica. De hecho, esta combinación lleva a discusiones sobre lo que se entiende por elemento de realidad. A los ojos de Einstein, Podolsky y Rosen [1] cualquier elemento de realidad física requiere que “sin perturbar en modo alguno un sistema se pueda predecir con certeza el valor de una cantidad física”. Sin embargo, las correlaciones cuánticas observadas en múltiples experimentos implementados cuidadosamente muestran que existen circunstancias en que las expectativas de mediciones sobre un subsistema pueden verse alteradas por la elección de medidas efectuadas sobre otra parte del sistema, esto sin importar la separación espacial entre ambos. Bell [2] propone a qubits entrelazados para que, de una manera cuantitativa y directamente verificable, se estudien los aspectos no locales de la mecánica

cuántica. Recientemente se han mostrado y medido diferentes desigualdades entre las propiedades de subsistemas que permiten esclarecer en que condiciones un estado entrelazado permite o no observar correlaciones direccionales como las de experimentos tipo EPR [3] o desigualdades tipo Bell. Con ello puede cuantificarse el grado de “cuantidad” de un estado.



**Figura 34.1:** No todos los estados de un sistema compuesto bipartita están entrelazados; cuando eso ocurre, no siempre sus correlaciones pueden utilizarse para verificar relaciones tipo direccionamiento EPR o de Bell.

El carácter probabilístico de la física cuántica abre preguntas concretas acerca de la información que puede extraerse de un sistema en términos de la función de onda, para sistemas cerrados, o la matriz de densidad, para sistemas abiertos. La teoría de información cuántica presenta diferencias fundamentales con la clásica. La información mutua es una medida de la dependencia recíproca entre dos variables que requieren una descripción probabilística. Para sistemas descritos por la física clásica, la información mutua puede utilizarse para cuantificar correlaciones vía identidades que evitan ambigüedades en su definición. Esto no ocurre en sistemas cuánticos donde la llamada “discordia cuántica” [4] muestra que la evaluación de la información mutua en términos de probabilidades condicionales puede diferir de su evaluación en términos de la información contenida en los entes probabilísticos locales y globales usados para describir al sistema.

A finales del siglo pasado, en la búsqueda de la comprobación experimental de la validez de las predicciones cuánticas, se inició el desarrollo de tecnologías que permiten un gran control del estado de átomos aislados, campos electromagnéticos, gases de átomos y moléculas, y sistemas híbridos luz-materia. Ha sido necesario explorar, y en su caso controlar, la fragilidad de las correlaciones cuánticas en diferentes escenarios. En el camino

se han tendido puentes entre la física clásica y la física cuántica de sistemas abiertos. Los términos diagonales de la matriz densidad que describe un sistema cuántico abierto tienen una interpretación probabilística directa, mientras que los términos fuera de la diagonal se conocen como coherencias y de forma implícita contienen información sobre la interdependencia de las opciones en que se puede encontrar el sistema bajo estudio. Si por alguna circunstancia física los elementos fuera de la diagonal son despreciables bajo una aproximación razonable, este sistema puede analizarse usando solo probabilidades de ocupación de los estados que definieron a la matriz densidad: utilizar fenomenología clásica para entender el comportamiento de ese sistema es entonces factible. El costo es la pérdida de información resultante de ignorar a los efectos de los términos no diagonales de la matriz densidad. Se dice entonces que la “decoherencia” impide observar a las correlaciones cuánticas.

Un ejemplo especialmente significativo del control actual sobre las coherencias cuánticas de sistemas mesoscópicos es el estudio experimental del llamado cruce BEC-BCS en gases atómicos ultra fríos. Este fenómeno se presenta al modificar en forma continua la intensidad y signo —atracción o repulsión— de las interacciones a pares entre partículas que satisfacen el principio de exclusión de Pauli (fermiones) y cuyo estado interno se encuentra en alguna de dos opciones diferentes. Si el sistema está suficientemente diluido como para que dominen las colisiones de dos cuerpos, existen varios estados asintóticos. Uno de ellos corresponde a un régimen en que se crean estados ligados de una pareja de fermiones. Las parejas de fermiones consideradas como partículas compuestas no satisfacen el principio de exclusión, es decir, son bosones. La interacción remanente entre estos dímeros es ligeramente repulsiva. Otro régimen asintótico corresponde a aquel en el que la interacción entre parejas de fermiones es ligeramente atractiva. Las correlaciones cuánticas son entonces semejantes a un gas de electrones con una débil atracción inducida por el medio en que se encuentran. Esta configuración es base del modelo que se utiliza para describir la superconductividad de bajas temperaturas. Finalmente, existe un régimen intermedio que corresponde a un gas de fermiones con una interacción que idealmente es de contacto y con intensidad infinita. Este régimen conocido como de unitariedad presenta correlaciones cuánticas no totalmente entendidas y que a la fecha son de gran interés para la comunidad científica. Uno de los motivos es que en él se esperan observar propiedades *universales*, es decir, aplicables a todo gas de fermiones en condiciones semejantes, sean éstos partículas subnucleares o sistemas atómicos. Un ejemplo de los pri-

meros es el carozo de una estrella de neutrones, y de los segundos, un gas degenerado de Fermi en un campo magnético adecuado para inducir una resonancia de Feshbach.

Actualmente las correlaciones cuánticas inducidas en sistemas controlados se utilizan para realizar tareas específicas. Una de ellas compete directamente a la temática de este compendio (ver [Capítulo 37](#)). Nos referimos a los simuladores cuánticos [5]. Cuando se construye un simulador cuántico se busca obtener información de algunas propiedades esperadas de sistemas físicos que son muy difíciles de estudiar al detalle en el laboratorio y cuyo modelaje presenta dificultades serias por la complejidad numérica subyacente. La metodología involucra reconocer las propiedades que quieren estudiarse, establecer una analogía clara que permita el diseño del simulador que realizará la tarea e identificar las fuentes de incertidumbre de esta simulación. Las correlaciones cuánticas se convierten entonces en herramientas informáticas aplicables a sistemas de interés puramente físico o de otras disciplinas como la biología.

## GLOSARIO

- **Aproximación de campo medio:** Aproximación en la que el comportamiento de un subsistema que interactúa con las otras componentes del sistema global se ve reemplazada por una interacción efectiva que promedia efectos de los otros subsistemas. En el ejemplo aquí descrito la interacción electromagnética entre electrones se reemplaza por una interacción promedio optimizada para minimizar los efectos de esta aproximación.
- **Matriz densidad:** Es una matriz que permite representar tanto el estado de un sistema cuántico abierto como cerrado. En el caso de sistemas cerrados se habla de estados puros y la matriz densidad contiene la misma información que la función de onda.
- **Teoría de la información:** Es la teoría que estudia la cuantificación, almacenamiento y comunicación de la información. Fue propuesta por Claude E. Shannon en 1948 en el contexto de sistemas probabilísticos congruentes con la física clásica y extendido en las últimas décadas al ámbito cuántico.
- **Resonancia de Feshbach:** Se presenta cuando dos o más partículas colisionan con energías entrantes muy similares a las de un estado ligado de las partículas; conlleva que aún un débil acoplamiento entre

las partículas, pueda producir una mezcla considerable entre al menos esos dos canales de dispersión.

PARA SABER MÁS:

- Peres A., *Quantum Theory: Concepts and Methods*, Springer Science and Business Media, 2006, 430 pp.
- Haroche S. y Raimond J. M., *Exploring the Quantum: Atoms, Cavities, and Photons*, Oxford University Press, 2006, 603 pp.
- Reid M. D., Drummond P. D., Bowen W. P., Cavalcanti E. G., Lam P. K., Bachor H. A., Andersen U. L., and Leuchs G., *Colloquium: The Einstein-Podolsky-Rosen paradox: From concepts to applications*, Rev. Mod. Phys. 81, 1727 (2009).
- Cirac J. I. y Zoller P., *Goals and opportunities in quantum simulation*, Nature Physics 8, 264 (2012).
- Shannon C.E., *A Mathematical Theory of Communication*, Bell System Technical Journal, 27, pp. 379-423 y 623-656, 1948.
- Chin C., Grimm R., Julienne P., Tiesinga E., *Feshbach resonances in ultracold gases*, Rev. Mod. Phys. 82, 1225 (2009).
- Bennett C. H. y Shor P. W., *Quantum Information Theory*, IEEE Transactions and Information Theory 44, 2724 (1998).

REFERENCIAS

- [1] A. Einstein, B. Podolsky y N. Rosen, «Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?», *Physical Review*, vol. 47, n.º 10, págs. 777-780, mayo de 1935.
- [2] J. S. Bell, «On the Einstein Podolsky Rosen paradox», *Physics Physique Fizika*, vol. 1, n.º 3, págs. 195-200, nov. de 1964.
- [3] M. D. Reid, «Demonstration of the Einstein-Podolsky-Rosen paradox using nondegenerate parametric amplification», *Physical Review A*, vol. 40, n.º 2, págs. 913-923, jul. de 1989.
- [4] L. Henderson y V. Vedral, «Classical, quantum and total correlations», *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 34, n.º 35, págs. 6899-6905, ago. de 2001.

- [5] R. P. Feynman, «Simulating physics with computers», *International Journal of Theoretical Physics*, vol. 21, n.º 6, págs. 467-488, jun. de 1982.



## FUERZAS DEL VACÍO CUÁNTICO

Carlos Villarreal Luján\*

Cualquier región del Universo, aún en ausencia de materia o de luz, está permeada por las fluctuaciones de energía del vacío. También denominada energía del punto cero, es la mínima posible que puede alcanzar un sistema cuántico y está originada por fluctuaciones energéticas asociadas al Principio de Incertidumbre de Heisenberg. Las fluctuaciones del vacío pueden asociarse a campos de propagación de interacciones, como el electromagnético o el gluónico, o pueden tener origen en excitaciones de campos de materia del tipo fonónico, plasmónico, de espín, etc. En este capítulo se discuten algunas consecuencias físicas inherentes a la no trivialidad del vacío.

En general, un campo cuántico puede descomponerse en modos elementales cuya dinámica está determinada por las vibraciones de un oscilador armónico cuántico en el que la energía de cada modo tiene un espectro  $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ , donde  $\hbar$  es la constante de Planck dividida por  $2\pi$ . Concluimos que aún en el estado de cero cuantos, con  $n = 0$ , el modo tiene una energía finita  $E_0 = \hbar\omega/2$ . Consideremos el caso más simple de un campo escalar  $\phi(\mathbf{r}, t)$  que satisface una ecuación de onda

$$\nabla^2\Phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2}. \quad (35.1)$$

Una separación de variables permite escribir el campo en monocromáticas de frecuencia angular  $\omega$ :

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r})\hat{a}(t) + \phi(\mathbf{r})\hat{a}^\dagger(t), \quad (35.2)$$

en donde  $\phi(\mathbf{r})$  está determinada por la ecuación de Helmholtz

$$\nabla^2\phi(\mathbf{r}) + k^2\phi(\mathbf{r}) = 0. \quad (35.3)$$

---

\*Departamento de Física Cuántica y Fotónica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

Aquí, el número de onda satisface la relación de dispersión  $k^2 = \omega^2/c^2$  (con  $c$  la velocidad de la luz en el vacío) y los operadores de aniquilación y creación de partículas  $\hat{a}(t)$  y  $\hat{a}^\dagger(t)$ , cumplen con una ecuación de oscilador armónico,  $\ddot{\hat{a}}(t) + \omega^2\hat{a}(t) = 0$  (y su compleja conjugada); según la naturaleza bosónica o fermiónica de los campos, los operadores cuánticos satisfacen relaciones de Heisenberg de conmutación,  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ , o de anticonmutación,  $\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} = 1$ , respectivamente.

Un caso muy importante por sus consecuencias físicas es aquel en el que un campo escalar representa a cada una de las componentes de un campo electromagnético, el cual tiene carácter vectorial. En este caso, el potencial vectorial  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  se puede desarrollar como una superposición de modos del campo de frecuencia  $\omega_k$ :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left( \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V} \right) \left[ \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_k t)} + \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega_k t)} \right] \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}, \lambda}. \quad (35.4)$$

Aquí,  $V$  es el volumen del sistema y  $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}, \lambda}$  es un vector unitario que representa los modos de polarización independientes del campo. El factor entre paréntesis permite normalizar correctamente las expresiones para la energía, el momento lineal y el momento angular del campo cuántico. Los campos eléctrico y magnético pueden derivarse del potencial vectorial (en la norma de Coulomb,  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ ) mediante las relaciones

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (35.5)$$

(en unidades CGS), los cuales a su vez determinan la densidad de energía del campo:

$$\varepsilon = \frac{1}{8\pi} (|\mathbf{E}^2| + |\mathbf{B}^2|). \quad (35.6)$$

Cuando se introducen las expresiones para el campo electromagnético en esta última expresión, se obtiene que la energía del campo está dada por

$$H = \int d^3r \varepsilon = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}, \lambda} \left( \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \right). \quad (35.7)$$

Vemos que aún cuando el número de partículas de cada modo del campo es nulo:  $n_{\mathbf{k}, \lambda} = \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda} = 0$ , la energía total del campo es infinita. Sin embargo, si comparamos la diferencia de energía entre dos configuraciones del campo, la energía del campo puede ser finita, y esto conduce a fenómenos notables.

La densidad de energía de un campo se obtiene como el producto de la energía de un modo por el número de modos por unidad de frecuencia y unidad de volumen  $n(\omega)$ . Argumentos simples conducen a que, en el caso electromagnético en un espacio libre  $n(\omega) = \omega^2/\pi c^3$ , por lo cual la densidad espectral de energía del campo de vacío es

$$\varepsilon(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2} n(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{2\pi^2 c^3}. \quad (35.8)$$

Puede demostrarse que esta expresión es invariante relativista. En consecuencia, la existencia de campos de vacío no da lugar a sistemas de referencia privilegiados y son entonces indetectables por observadores en un estado de movimiento inercial. Sin embargo, un observador en un sistema de referencia privilegiado (no inercial) puede detectar efectos asociados a las fluctuaciones cuánticas. En otras palabras, si la invariancia de Lorentz de un sistema se rompe por la presencia de fronteras materiales, campos externos, o movimientos acelerados, entonces la densidad espectral de energía ya no corresponde a la del sistema libre, el cual es isotrópico y homogéneo.

Una de las manifestaciones físicas más simples del vacío cuántico, que ha permitido estudiar su estructura con mayor profundidad, es la de las fuerzas de Casimir, asociadas a la distorsión de la densidad espectral del vacío por placas conductoras. En 1947, los físicos H. B. G. Casimir y D. Polder trabajaban en los laboratorios Philips en Holanda investigando las fuerzas de atracción de Van der Waals que existen entre las partículas suspendidas en un coloide. La simplicidad de la expresiones que encontraron llamó la atención de Casimir, quien se lo comentó a Niels Bohr durante una caminata. Según narra Casimir, Bohr murmuró algo sobre que el fenómeno debería estar asociado a las fluctuaciones del vacío. A raíz de esta conversación, Casimir decidió estudiar los efectos producidos por las fluctuaciones del campo electromagnético de vacío confinado por dos placas paralelas perfectamente conductoras y separadas por una distancia  $L$  [1]. Casimir llegó a la conclusión de que entre las placas debería aparecer una fuerza atractiva (por unidad de área):

$$F(L) = \frac{-\hbar c}{240\pi^2} \frac{1}{L^4}. \quad (35.9)$$

Si bien no fue la ruta seguida por Casimir, esta expresión puede encontrarse integrando la densidad de energía de vacío modificada por la presencia de las placas:  $E(L) = \int d\omega \varepsilon(\omega)$ , con  $\varepsilon(\omega) \sim \hbar\omega^3 \sum_n \text{sen}(2\omega nL)/2\omega nL$ , y derivando respecto a  $L$  para obtener la fuerza.

La fuerza de Casimir es diminuta a escalas macroscópicas y es relevante a escalas del orden o menores que micras ( $r \sim 10^{-6}$  m). Como consecuencia,

sólo fue en fechas relativamente recientes en que los estudios experimentales de la fuerzas de Casimir alcanzaron la precisión necesaria para verificar con detalle las predicciones teóricas. Para ello, es importante tomar en cuenta las propiedades específicas de los materiales empleados en las mediciones, los efectos de temperatura finita, la rugosidad de las superficies, etc. Esto fue posible gracias a los cálculos desarrollados por Lifshitz en 1956 en donde consideró placas con propiedades dieléctricas realistas y los efectos de temperatura. Los cálculo de Lifshitz son extremadamente complejos. Una derivación simple de estas fuerzas para materiales con propiedades dispersivas y disipativas arbitrarias, puede encontrarse en la referencia [2].

Las ideas de Casimir pueden generalizarse para considerar geometrías más complicadas, como las asociadas a cavidades rectangulares, cilíndricas o esféricas. Para ello, hay que encontrar la densidad de estados  $n(\omega)$  asociada a cada configuración. En cada caso,  $n(\omega)$  queda determinada por la transformada de Fourier de la función de Green de un sistema con las condiciones a la frontera adecuadas. Un resultado sorprendente es que en este tipo de configuraciones las fuerzas de Casimir pueden perder su carácter atractivo y tornarse repulsivas. Esto es una consecuencia simple de la conservación del tensor energía-momento para el campo electromagnético. La existencia de fuerzas de Casimir repulsivas derivadas de la geometría es controversial y a la fecha existen debates sobre su realidad física.

Otras manifestaciones asociadas a fluctuaciones de campos confinados son las fuerzas de Casimir derivadas de fluctuaciones electrónicas en un medio conductor, o aquellas provenientes de fluctuaciones del campo de sonido en un líquido. En el caso electrónico, podemos considerar una configuración formada por dos materiales conductores separados por una ranura delgada, de manera que puede ocurrir tunelamiento electrónico entre ambos materiales. La fuerza resultante se deriva calculando el flujo de momento proveniente del traslape de los campos electrónicos evanescentes, cuya función de onda es solución de la ecuación de Schrödinger del sistema.

Existen efectos tipo Casimir que, asociados a la distorsión de la densidad espectral de la energía del vacío libre, ya no por fronteras físicas, sino por la acción de campos externos, o aún por la deformación del espacio-tiempo asociada a sistemas no inerciales. Si consideramos un observador con una aceleración uniforme  $a$  en el vacío cuántico, la densidad de energía por modo tiene la forma

$$\varepsilon(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{2\pi\omega/a} - 1} \right). \quad (35.10)$$

En este caso, la densidad espectral del vacío libre se ve alterada por una distribución de tipo planckiano, similar a la observada para la radiación electromagnética de un cuerpo negro con una temperatura equivalente  $k_B T = a/2\pi$ , aún cuando en este problema no se considera un reservorio de calor a temperatura constante. Puede demostrarse que este efecto pseudotérmico, denominado Unruh-Davies, proviene de la distorsión de la densidad espectral libre por el corrimiento Doppler de las frecuencias observado en un sistema de referencia uniformemente acelerado.

Un fenómeno similar ocurre para las fluctuaciones del vacío en espacio-tiempos curvos. Según el Principio de Equivalencia de la Teoría de la Relatividad General, dado que los sistemas acelerados son localmente equivalentes a la existencia de campos gravitacionales, lo mismo ocurrirá para el campo de vacío sujeto a la curvatura del espacio-tiempo en la vecindad de un cuerpo gravitante. Un caso particular es el conocido fenómeno de la radiación de hoyos negros de Hawking: Si consideramos las fluctuaciones de vacío de un campo cuántico escalar y sin masa alrededor un hoyo negro de Schwarzschild bidimensional de masa  $M$ , un observador en reposo en la posición  $r = r_0$  observará una distribución de energía

$$\varepsilon(\omega) = 2 \left(1 - \frac{2M}{r_0}\right) \frac{\hbar\omega}{\pi c} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{2\pi\omega/a} - 1}\right). \quad (35.11)$$

En este caso aparece de nuevo una distribución planckiana, como si el hoyo negro calentara el vacío a su alrededor. Sin embargo, existen derivaciones de este fenómeno como una consecuencia del corrimiento Doppler gravitacional de las frecuencias involucradas en la densidad espectral del vacío libre y no necesariamente debido a una evaporación de energía, como normalmente se interpreta la radiación de Hawking.

Los anteriores son sólo algunas de las manifestaciones de las fluctuaciones cuánticas. Las fuerzas intermoleculares de Van der Waals, que dan lugar a los estados de agregación, sólido, líquido o gaseoso, de multitud de sustancias se originan de las interacciones dipolares atómicas fluctuantes, resultantes a su vez, de aquellas del vacío. Por otro lado, actualmente se entiende la emisión atómica espontánea como un decaimiento inducido por las fluctuaciones electromagnéticas, las cuales contribuyen a la radiación de cuerpo negro que observamos como luz solar, o como radiación rojiza observada en los hornos de panadería y de fundición, en la lava, en los focos incandescentes, o aún en aquella desprendida por el cuerpo humano, apreciable en fotografías infrarrojas. Otra resultante de dichas fluctuaciones es la radiación de fondo de 2.7 K del Universo.

Existen especulaciones de que el campo de punto cero podría representar una componente fundamental o la totalidad de la energía oscura del Universo. También podría jugar un papel como mecanismo de compactificación de dimensiones extra en las teorías de gran unificación. Existen muchas interrogantes por contestar.

#### PARA SABER MÁS

- C. Villarreal. "Fuerzas de Casimir", en *Fronteras de la Física en el siglo XXI*. Octavio Miramontes y Karen Volke, Ed. CopIt Archives, 2013.
- F. Soto, et. al., *El vacío en sistemas no inerciales*, Revista Mexicana de Física. Vol. 33, 389-411 pp., 1987.
- P. W. Milonni, *The Quantum Vacuum. An Introduction to Quantum Electrodynamics*, Academic Press Inc., Boston, 1994.

#### REFERENCIAS

- [1] H. B. G. Casimir, «On the attraction between two perfectly conducting plates», *Proceedings of the Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences*, vol. 51, págs. 793-795, 1948.
- [2] W. L. Mochán y C. Villarreal, «Casimir effect for arbitrary materials: Contributions within and beyond the light cone», *New Journal of Physics*, vol. 8, n.º 10, págs. 242-242, oct. de 2006.

## ¿ES POSIBLE OBSERVAR UN ESTADO CUÁNTICO A ESCALA MACROSCÓPICA?

*Jorge Amin Seman Harutinian\**

Es común encontrar en la física una división entre el mundo macroscópico y el mundo microscópico. Al primero, el de nuestra experiencia diaria, normalmente lo describimos utilizando la física clásica. En cambio, el segundo, el de los átomos y las moléculas, se describe utilizando la mecánica cuántica. Esta división se trata más bien de una idealización que nos ayuda a simplificar la descripción del mundo. En este capítulo discutimos un caso límite en el que esta división desaparece: utilizando como ejemplo el caso de un gas diluido, mostramos que existen condiciones, alcanzables en laboratorios modernos, bajo las cuales es posible observar un sistema macroscópico descrito por medio de un único estado cuántico.

### CUANDO LAS PARTÍCULAS SE COMPORTAN COMO ONDAS

Uno de los resultados más sorprendentes de la mecánica cuántica es el principio de la dualidad onda-partícula que establece que las partículas que constituyen la materia, como es el caso de los átomos y las moléculas, pueden comportarse ya sea como partículas puntuales o como ondas extendidas. Esta característica es responsable de que efectos como la interferencia y difracción estén presentes en sistemas que intuitivamente imaginamos como siendo masas puntuales ([Capítulo 28](#)). Este principio asocia una longitud de onda  $\lambda$  a una partícula que porta momento  $p$  a través de la siguiente expresión:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (36.1)$$

---

\*Departamento de Física Cuántica y Fotónica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

en donde  $h$  es la constante de Planck y  $\lambda$  es también conocida como *longitud de onda de de Broglie*. Así, esta expresión nos permite cuantificar la naturaleza ondulatoria de las partículas.

Sin embargo, a escala macroscópica los efectos cuánticos y la dualidad onda-partícula no se observan, siendo la física clásica quien proporciona una adecuada y más simple descripción del mundo. Así pues, una pregunta que fácilmente podría venir a nuestra mente es justamente la que titula este capítulo: ¿es posible observar un estado cuántico a escala macroscópica? En otras palabras, ¿es posible encontrar un sistema macroscópico compuesto por una gran cantidad de partículas que, bajo alguna condición especial, pueda ser descrito por medio de un único estado cuántico?

Existe una manera simple de responder a esta pregunta. Consideremos un gas a temperatura  $T$ , compuesto por  $N$  átomos idénticos cuya masa es  $m$  y que se encuentra confinado en una caja de volumen  $V$ , lo que significa que la densidad de partículas del gas es  $n = N/V$ . Adicionalmente, haremos una aproximación muy importante que consiste en suponer que el gas es *diluido*. Esto significa que la separación promedio entre los átomos es lo suficientemente grande como para que las colisiones entre átomos sean poco probables<sup>1</sup>. En otras palabras, un gas diluido se trata de un gas ideal, lo que simplifica nuestra discusión. Este es un sistema macroscópico enteramente clásico que, a pesar de ser muy simple, contiene toda la física necesaria para entender el problema.

Ahora bien, la física estadística nos enseña que la velocidad con la que cada uno de los átomos se mueve cumple con una distribución estadística que para el caso del gas ideal resulta ser la distribución de Maxwell-Boltzmann. Esta distribución relaciona la temperatura  $T$  del gas con el momento promedio  $p$  de los átomos a través de la expresión [1]:

$$p \sim \sqrt{mk_B T}, \quad (36.2)$$

en donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann. Utilizando las ecuaciones (36.1) y (36.2) es posible conocer cuál es, en promedio, la longitud de onda de de Broglie de los átomos que componen al gas cuando éste se encuentra a temperatura  $T$ . Esta longitud de onda, que llamaremos longitud de onda *térmica* de de Broglie,  $\lambda_T$ , está dada por:

<sup>1</sup>Una forma más cuantitativa de verlo es considerar a  $r_0$  como la distancia máxima que debe existir entre dos átomos para que uno sienta la presencia del otro. Es decir,  $r_0$  es el alcance de la fuerza que ejercen estos átomos entre sí. Por otro lado, la separación promedio entre los átomos del gas,  $\ell$ , está determinada por la densidad  $n$  por medio de la expresión  $\ell = n^{-1/3}$ . La condición de gas diluido se cumple si  $r_0 \ll \ell$ .



$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}. \quad (36.3)$$

Sustituyamos algunos números para entender el significado de  $\lambda_T$ . En los experimentos actuales es común utilizar un gas de átomos de rubidio cuya masa es  $m \simeq 1.44 \times 10^{-25}$  kg y cuya densidad aproximadamente es  $n \sim 10^{17}$  átomos/m<sup>3</sup>. Si el gas se encuentra a temperatura ambiente ( $T = 300$  K) la longitud de onda asociada es  $\lambda_T \sim 10^{-11}$  m. Esto significa que la extensión del paquete de onda asociado a cada uno de los átomos del gas es menor que el diámetro estimado del átomo mismo, que corresponde aproximadamente al radio de Bohr,  $a_0 \simeq 5 \times 10^{-11}$  m. Resulta natural preguntarse cómo se compara  $\lambda_T$  con la separación entre los átomos  $\ell$ , la cual está relacionada con la densidad del gas por medio de  $\ell = n^{-1/3} \sim 2 \times 10^{-6}$  m. Como podemos ver  $\ell \gg \lambda_T$ . Es decir, la separación entre los átomos es mucho mayor que la longitud asociada a su comportamiento ondulatorio, por lo que cualquier efecto relacionado a la interferencia entre estos paquetes de onda será muy pequeño. En consecuencia la naturaleza ondulatoria no se manifiesta a escala macroscópica y el gas puede ser visto como un sistema clásico compuesto por masas puntuales<sup>2</sup>.

Notemos que la ecuación (36.3) indica que  $\lambda_T \propto T^{-1/2}$ , por lo que  $\lambda_T$  crece al disminuir la temperatura del gas. Así, para una temperatura suficientemente baja,  $\lambda_T$  podría hacerse igual o mayor que  $\ell$ , provocando que la interferencia entre ondas de de Broglie cobre importancia en la dinámica del sistema. De modo que al imponer la condición  $\ell = \lambda_T$  podemos encontrar una temperatura  $T_Q$  por debajo de la cual la naturaleza cuántica del sistema se manifiesta. De dicha condición se obtiene

$$T_Q = \frac{h^2 n^{2/3}}{2\pi mk_B}. \quad (36.4)$$

El estado correspondiente puede verse como el resultado de numerosos paquetes de onda interfiriendo constructivamente para dar origen a una única onda macroscópica de materia. Otra forma de ver esto es la siguiente. Al disminuir la temperatura del gas estamos removiendo la energía del sistema, es decir, estamos forzando a que cada átomo ocupe el estado de menor energía posible. Desde la perspectiva de la mecánica cuántica, esto se

<sup>2</sup>Aquí vale la pena mencionar que el gas de rubidio considerado efectivamente satisface la condición de gas diluido. Como se mencionó, para este caso  $\ell \sim 2 \times 10^{-6}$  m. Por otro lado, en este sistema el alcance de las fuerzas interatómicas es del orden de cien radios de Bohr,  $r_0 \sim 100a_0 \simeq 5 \times 10^{-9}$  m, por lo que claramente se cumple la condición  $r_0 \ll \ell$ .

traduce en que cada uno de los átomos queda descrito por la misma función de onda, que en este caso corresponde a la función de onda del estado de menor energía del sistema. En otras palabras, tenemos que un único estado cuántico, el estado base, es ocupado en forma macroscópica. Esto responde nuestra pregunta inicial: sí, es posible observar un estado cuántico a escala macroscópica y una ruta para ello es disminuir la temperatura del sistema<sup>3</sup>.

#### EL EFECTO DE LA ESTADÍSTICA CUÁNTICA

En la discusión anterior hemos ignorado la estructura interna de los átomos, la cual resulta fundamental para entender las propiedades de estos sistemas cuánticos. Sabemos que las partículas tienen un grado de libertad interno conocido como *espín* que está asociado a su momento angular intrínseco. Las partículas con espín entero (es decir,  $s = 0, 1, 2, \dots$ ) se les conoce como *bosones* y aquellas con espín semi-entero ( $s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ ) se les conoce como *fermiones*. La diferencia más importante entre éstos es el hecho de que los fermiones respetan el principio de exclusión de Pauli que prohíbe que dos fermiones idénticos ocupen el mismo estado cuántico, en cambio, los bosones no sufren de esta restricción y es posible tener más de un bosón en un determinado estado.

Cuando el gas se encuentra a alta temperatura (es decir, cuando  $\ell \gg \lambda_T$ ) el comportamiento de un gas de bosones es esencialmente idéntico a uno de fermiones: ambos se comportan como un gas ideal. Sin embargo, al disminuir la temperatura (cuando  $\ell \leq \lambda_T$ ) la diferencia es abismal.

El caso de los bosones es particularmente interesante. Por debajo de una cierta temperatura crítica los bosones comienzan a ocupar el estado cuántico de menor energía y para una temperatura suficientemente baja prácticamente *todos* los bosones ocuparán dicho estado. Esta ocupación macroscópica de un único estado cuántico corresponde justamente a la situación en donde las ondas de de Broglie interfieren para formar una única gran onda de materia. Este estado es conocido como *condensado de Bose-Einstein* (BEC por sus siglas en inglés) y puede demostrarse que la temperatura crítica correspondiente está dada por [1]

$$T_C \simeq 0.51 \frac{h^2 n^{2/3}}{2\pi m k_B}, \quad (36.5)$$

<sup>3</sup>Esta no es necesariamente la única forma de lograrlo. Aumentando la densidad del gas también podríamos satisfacer la condición  $\ell = \lambda_T$ . Esto, no obstante, nos alejaría de la aproximación de gas ideal introduciendo efectos adicionales que complican el análisis del sistema, por lo que no abordaremos esta situación en nuestra discusión.

un valor sorprendentemente similar al que obtuvimos en la ecuación (36.4).

El caso de los fermiones es muy diferente. En este caso el principio de exclusión de Pauli impide la ocupación macroscópica de un único estado, de manera que al disminuir la temperatura del gas los átomos ocupan los primeros  $N$  estados de menor energía, recordando que  $N$  es el número total de partículas que constituyen al gas. Aunque este sistema, conocido como *gas degenerado de Fermi*, también exhibe propiedades cuánticas, mantendremos nuestra discusión únicamente para el caso de los bosones.

Para finalizar esta Sección, valdría la pena abundar un poco en las ideas que conducen a la ecuación (36.4). Primero, es necesario notar que la densidad del gas es una función de la temperatura  $T$  y del potencial químico  $\mu$ , esto es,  $n = n(T, \mu)$ . Supongamos ahora que enfriamos al gas manteniendo  $n(T, \mu)$  constante. Para que esto ocurra, el valor de  $\mu$  debe cambiar en forma tal que aunque  $T$  disminuya, la densidad  $n$  se mantenga constante. La física estadística nos enseña que existe un valor finito de la temperatura, que justamente corresponde a  $T_C$ , a partir del cual el potencial químico  $\mu$  alcanza un valor máximo y debajo del cual no cambia más. Esto tiene como consecuencia que cuando  $T < T_C$  la densidad del gas comience a disminuir. En otras palabras, es imposible reducir la temperatura del gas por debajo de la temperatura crítica  $T_C$  manteniendo  $n$  fija. Esta aparente contradicción se resuelve al notar que es posible escribir la densidad del gas como la suma de la contribución de los átomos en el estado de menor energía,  $n_0$ , y la contribución de los átomos en todos los demás estados,  $n_e$ , es decir  $n = n_0 + n_e$ . Normalmente, cuando la temperatura es alta (esto es,  $T > T_C$ ), el término  $n_0$  es despreciable comparado con  $n_e$ . Sin embargo, al disminuir  $T$  por debajo de la temperatura crítica, el valor de  $n_0$  comienza a aumentar mientras que  $n_e$  disminuye, haciendo posible que  $n$  se mantenga constante. Así, por debajo de  $T_C$ , los átomos que formaban la contribución de  $n_e$  comienzan a migrar al estado base del sistema. Cuando  $T \ll T_C$  prácticamente todos los átomos del sistema se encuentran en el estado base, transformando a  $n_0$  en una contribución macroscópica de la densidad, es decir, la condensación de Bose-Einstein emerge.

#### ÁTOMOS ULTRAFRÍOS EN EL LABORATORIO

Hemos omitido hasta ahora un detalle fundamental: ¿de qué orden es la temperatura crítica  $T_C$ ? Para el gas diluido que hemos estado considerando,  $T_C \sim 100$  nK. ¡Menos de un millonésimo de grado arriba del cero absoluto! Se trata de las temperaturas más bajas del universo, lo que permite entender

el enorme desafío experimental que representa alcanzarlas.

La primera observación de la condensación de Bose-Einstein en un gas diluido fue realizada en el año de 1995 en tres diferentes laboratorios en Estados Unidos [2], dando origen al prolífico campo de investigación de los átomos *ultrafríos*, una de las áreas más activas de la física atómica contemporánea. Esto fue posible gracias a décadas de investigación y desarrollo de sofisticadas técnicas de enfriamiento. Aquí presentaremos apenas un breve esbozo de las ideas que se encuentran por detrás de dichas técnicas. Una revisión integral al respecto puede encontrarse en la referencia [3].

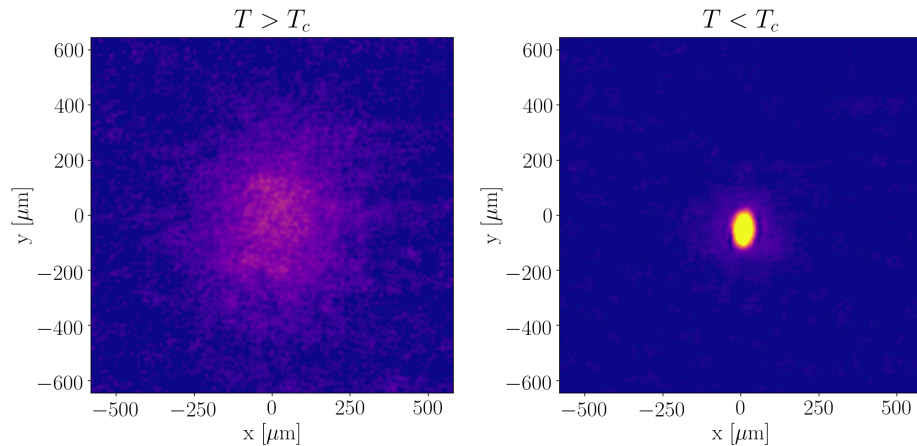
Las muestras ultrafrías se producen en el interior de trampas que se generan utilizando, por ejemplo, campos magnéticos. Esto se debe a dos motivos, el primero consiste en que a estas trampas, que podemos imaginar como contenedores magnéticos, no se les puede asociar una temperatura, lo que garantiza que no hay paredes de un recipiente que calienten la muestra. El segundo motivo es que la trampa se encarga de confinar al gas, de manera que su densidad  $n$  se mantenga bajo control pues, como vemos en la ecuación (36.5),  $n$  es quien define la temperatura crítica del gas. Adicionalmente, la trampa se produce en un ambiente a alto vacío lo que garantiza un aislamiento total del exterior.

Dentro de estas trampas se enfría al gas por debajo de la temperatura crítica por medio de dos procesos sucesivos. El primero, conocido como *enfriamiento láser*, utiliza el hecho de que la luz y la materia pueden intercambiar energía y momento. Así, iluminando los átomos del gas con luz láser es posible generar miles de ciclos de absorción y reemisión de fotones en donde dicho intercambio de energía y momento ocurre. Sintonizando con mucha precisión las propiedades de la luz es posible hacer que, en promedio, los átomos reduzcan su energía cinética. Eso permite generar nubes atómicas cuya temperatura puede llegar a ser tan baja como  $10\ \mu\text{K}$ . Aunque muy baja, esta temperatura es aún 100 veces más alta que la temperatura crítica  $T_C$ .

A partir de este punto se utiliza la segunda etapa de enfriamiento, conocida como *enfriamiento evaporativo*, que consiste en reducir de manera adiabática la intensidad de la trampa que confina a los átomos. Esto tiene como consecuencia que progresivamente los átomos más energéticos escapen del gas, de manera que la temperatura de los átomos restantes equilibra en un valor más bajo. Esto disminuye la temperatura del sistema por debajo de  $T_C$  permitiendo que ocurra la condensación de Bose-Einstein.

Las muestras producidas contienen del orden de  $10^5$  átomos y pueden ser tan grandes como décimas de milímetro (similar al diámetro de un cabe-

llo), por lo que pueden ser observadas utilizando sistemas ópticos simples. La condensación de Bose-Einstein puede ser fácilmente reconocida por medio de un abrupto aumento en la densidad del gas cuando su temperatura desciende por debajo de la temperatura crítica  $T_C$ . La figura 36.1 muestra fotografías que ilustran esta situación.

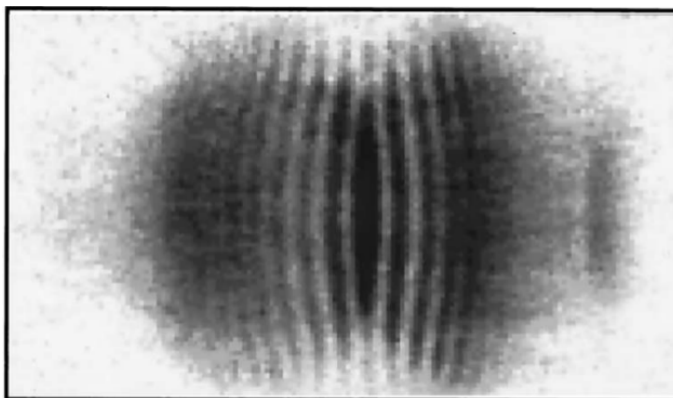


**Figura 36.1:** Fotografías de una nube de átomos ultrafríos de litio a diferentes temperaturas. El panel de la izquierda corresponde al caso en el que la temperatura del gas se encuentra por encima de la temperatura crítica  $T_C$ , en este caso el gas se comporta como un gas clásico. En cambio, el panel de la derecha muestra el caso en el que la temperatura está por debajo de la temperatura crítica y la condensación de Bose-Einstein ocurre. En ambas fotografías las zonas más brillantes indican mayor densidad, siendo claro el drástico aumento de la densidad del gas cuando  $T < T_C$ . Fotografías obtenidas en el Laboratorio de Materia Ultrafría del Instituto de Física de la UNAM.

#### PERO... ¿SON REALMENTE ONDAS DE MATERIA?

Existe un hermoso experimento que pone en manifiesto la naturaleza ondulatoria de los BECs [4]. Este experimento fue realizado en el Instituto Tecnológico de Massachusetts por el grupo de Wolfgang Ketterle en el año 1997. En el experimento se producen dos BECs independientes separados inicialmente por una barrera. En seguida se remueven abruptamente tanto la trampa que contiene a ambos condensados como la barrera que los separa. En consecuencia, los condensados comienzan a expandir y eventualmente empiezan a sobreponerse. Si se tratase de un gas clásico, la región de

superposición presentaría apenas la suma de la densidad de ambos gases. En contraste, para el caso del gas cuántico, el perfil de densidad exhibe un claro patrón de interferencia tal como ocurriría con dos ondas coherentes que se superponen. Esto se ilustra en la figura 36.2.



**Figura 36.2:** Fotografía de dos condensados de Bose-Einstein que se sobreponen después de expandir libremente. La región central muestra el patrón de interferencia entre estas dos ondas de materia. Las zonas más oscuras indican mayor densidad. Figura tomada de la referencia [4] y reproducida con permiso de la *American Association for the Advancement of Science* (AAAS).

Así, la condensación de Bose-Einstein es un ejemplo paradigmático de la naturaleza ondulatoria de la materia, además de ser el fenómeno natural en el que más claramente se exhibe la ocupación macroscópica de un único estado cuántico. Hoy en día, su investigación, así como la de otros sistemas ultrafríos, constituye un área de investigación muy activa cuyo impacto ha alcanzado muchas otras disciplinas como es el caso de la física de la materia condensada, la metrología y la simulación cuántica, así como el estudio de otros interesantes fenómenos cuánticos macroscópicos como es el caso de la superconductividad y la superfluidez.

En México también nos hemos sumado a los esfuerzos por explorar estos interesantes sistemas a través de la reciente creación del Laboratorio de Materia Ultrafría en el Instituto de Física de la UNAM. En este laboratorio se han producido los primeros condensados de Bose-Einstein en nuestro país y se realiza investigación de frontera en su estudio.

PARA SABER MÁS:

- Aboites, V., Vega, J., **Enfriamiento de átomos por láser**, Fondo de Cultura Económica (Colección: La Ciencia Para Todos), México, 2002, 90 pp.
- García-Colín Scherer, L. **De la máquina de vapor al cero absoluto (calor y entropía)**, Fondo de Cultura Económica (Colección: La Ciencia Para Todos), 3a edición, México, 2003, 149 pp.
- Ketterle, W., Durfee, D. S., Stamper-Kurn, D. M., **Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates**, editado por M. Inguscio, W. Ketterle, C. Salomon, Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", Vol: 140, IOS Press, Amsterdam, 2008, pp. 95-287. Una copia electrónica de este documento puede descargarse gratuitamente en el sitio:  
<https://arxiv.org/abs/cond-mat/9904034>
- Pethick, C.; Smith, H. **Bose-Einstein condensation in dilute gases**, Cambridge University Press, Cambridge, 2002.

REFERENCIAS

- [1] L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, 4 edition. Weinheim: Wiley-VCH, mayo de 2016.
- [2] W. Ketterle, «Experimental Studies of Bose-Einstein Condensation», *Physics Today*, vol. 52, n.º 12, pág. 30, ene. de 2008. (visitado 15-03-2020).
- [3] H. J. Metcalf, P. v. d. Straten y P. v. d. Straten, *Laser Cooling and Trapping*, ép. Graduate Texts in Contemporary Physics. New York: Springer-Verlag, 1999.
- [4] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner y col., «Observation of Interference Between Two Bose Condensates», *Science*, vol. 275, n.º 5300, págs. 637-641, ene. de 1997.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙



## SIMULANDO TRANSICIONES DE FASE EN EL RÉGIMEN CUÁNTICO

*Rosario Paredes Gutiérrez\**

Mucho queda por entender de la naturaleza de las transiciones de fase que ocurren en el régimen cuántico, en particular en lo que concierne a las propiedades que comparten los fenómenos de superconductividad y superfluidez. Estas transiciones se pueden estudiar a través sus análogos: los gases atómicos ultrafríos, que permiten “observar” el comportamiento de los fluidos en el régimen de muy bajas temperaturas. Por otro lado, desde un enfoque teórico es posible también estudiar y predecir las fases que emergen en el régimen cuántico. Este capítulo versa sobre los enfoques experimental y teórico para simular la materia y sus transiciones.

El propósito de este capítulo es hacer una descripción breve de los alcances que hoy en día se tienen tanto desde la perspectiva de los experimentos con vapores de átomos y/o moléculas a temperaturas en los nanoKelvin, como de las teorías formuladas en el contexto de la mecánica cuántica, en torno a la comprensión de transiciones de fase que ocurren a muy bajas temperaturas en el llamado régimen de degeneración. Como primer punto nos concentraremos en definir qué es una transición de fase y las propiedades que las distinguen. En particular se hará referencia a sistemas de muy distinta naturaleza que exhiben comportamientos similares cuando se encuentran cerca de una transición de fase. Posteriormente se dedicará un espacio para describir la forma en la cuál los gases atómicos ultrafríos son empleados para reproducir y simular el comportamiento y propiedades de la materia cuando, sometida a cierta temperatura, exhibe transiciones de fase que ponen de manifiesto la naturaleza cuántica de su comportamiento. Finalmente, se abordará una revisión de algunas de las teorías más exitosas que han llevado a la explicación de los fenómenos arriba mencionados, y

---

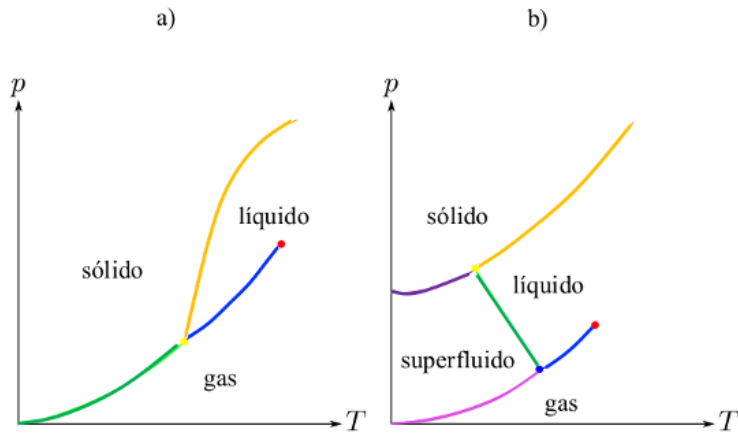
\*Departamento de Física Cuántica y Fotónica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

que siguen siendo usadas para estudiar y predecir el comportamiento de fenómenos relativamente nuevos.

#### TRANSICIONES DE FASE

El estudio y comprensión de las transiciones de fase le pertenece a la disciplina de la termodinámica, la cual, en términos de unas cuantas variables, como presión  $p$ , densidad  $\rho$  y temperatura  $T$ , entre otras, describe el estado de un sistema dado. Por ejemplo, las diferentes fases como líquido, sólido y vapor de gran cantidad de sustancias puras se ubican en algún punto de los llamados diagramas de fase presión-temperatura  $p$ - $T$ . En la figura 37.1a se ilustra el diagrama de fases  $p$ - $T$  que gran cantidad de sustancias comparten. Una transición de fase se detecta a través del cambio de las propiedades del material y ocurre al variar la presión y/o la temperatura. La densidad permite distinguir entre las diferentes fases y es precisamente el cambio abrupto de esta cantidad lo que hace posible registrar la ocurrencia de una transición de fase de primer orden. Dentro del esquema de la termodinámica decimos que una transición de fase de primer orden está caracterizada por el cambio abrupto o discontinuo de las variables extensivas que describen al material, donde variables extensivas se refiere a aquellas cantidades relacionadas con el tamaño del sistema en consideración, por ejemplo, la densidad está relacionada con el número de átomos y/o moléculas que componen el material. Vale la pena aclarar desde este momento que, si bien se conoce de manera amplia la fenomenología de las transiciones de gran diversidad de materiales, los diagramas de fase son resultado de mediciones experimentales que caracterizan los estados de los materiales, sin embargo, no existe una descripción rigurosa, o de primeros principios, que de cuenta de las mismas. En otras palabras, no existen ecuaciones que describan cómo un material pasa de ser sólido a gas o de sólido a líquido y viceversa. Sin embargo, es importante aclarar que existe una teoría sólida, que permite caracterizar la fenomenología universal las transiciones de fase, dicha teoría involucra la descripción de la transición en términos de exponentes críticos y la existencia de un parámetro de orden. Más adelante se hará referencia al llamado parámetro de orden que permite discernir cuándo ocurre la transición.

Por otro lado, cuando la temperatura y presión de un material disminuyen, en la región inferior izquierda del diagrama de fase, ver figura 37.1b, algunas sustancias adquieren un comportamiento diferente al referido antes. En particular, en 1937 Piotr Kapitsa, John Allen y Don Meissner descu-



**Figura 37.1:** Diagrama de fases del agua.

brieron que al enfriar  $^4\text{He}$  a temperaturas menores a 4.21 K, estando a muy bajas presiones, se observa una transición de fase a un nuevo estado de la materia. Dicho estado, que en apariencia parece ser líquido, se caracteriza por ofrecer una viscosidad nula, es decir, que fluye sin resistencia, a tal grado que ni siquiera las paredes del recipiente que lo contienen impiden que el material escape. A esta fase se le denominó estado superfluido (SF). Posteriormente se consiguió observar la fase SF del otro isótopo del helio, el  $^3\text{He}$ .

El descubrimiento de la fase SF del helio en 1937 fue, entre otros, resultado de la capacidad de licuar gases a temperaturas cercanas a los cero Kelvin, de hecho, desde los inicios del siglo XX se había conseguido llevar a su fase líquida a otros gases como  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2$  y  $\text{N}_2$ . En 1911, Kamerling Onnes aprovechando que era posible tener He líquido, se propuso estudiar la conductividad de diversos metales a bajas temperaturas. La gran sorpresa es que descubrió que el mercurio (Hg) se vuelve un material con una conductividad infinita, o equivalentemente, un metal con resistencia eléctrica nula, a temperaturas menores que 4.22 K; en otras palabras, se convierte en un superconductor (SC). Se dice que los fenómenos de SF y SC son análogos en el sentido que partículas neutras y electrones cargados negativamente fluyen sin resistencia por debajo de una cierta temperatura, denominada temperatura crítica. Enfatizamos entonces que entender la física de una u otra transición es equivalente.

Las transiciones a los estados SC y SF no son de primer orden, se clasifican como de segundo orden y están caracterizadas a través de un parámetro

de orden, además de que no es la discontinuidad de las variables extensivas la que permite reconocer la ocurrencia de la transición, sino la derivada de las mismas. Vale la pena señalar que en otro de los capítulos de este libro se presenta a las transiciones de fase en el contexto de rompimiento de simetrías ([Capítulo 22](#)), particularmente se hace la distinción en el orden de la transición dentro de la llamada teoría de Landau.

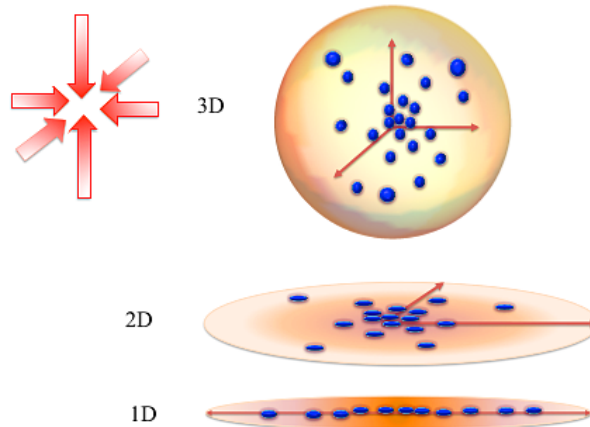
La peculiaridad que tienen las transiciones a los estados SF y SC es que son manifestaciones del comportamiento de la materia en el régimen cuántico. Lo esperado dentro de la teoría del electromagnetismo es que la resistencia de los metales disminuya linealmente con la temperatura a medida que ésta tiende a cero. El que no ocurra de esta forma hace ver que los átomos que componen la materia manifiestan su comportamiento cuántico en forma colectiva cuando se atraviesa cierto umbral de temperatura.

#### ATOMOS ULTRAFRÍOS COMO SIMULADORES DE LA MATERIA

En otro capítulo de este libro se describe cómo la carrera del enfriamiento no culminó a inicios del siglo XX, sino que se ha extendido hasta nuestros días ([Capítulo 36](#)). La enorme recompensa es que enfriando átomos alcalinos a temperaturas del orden de 100 nK se logró producir en 1995 la llamada condensación de Bose-Einstein y en 1999 el gas degenerado de Fermi [1, 2]. Como se sabe, la condensación de Bose-Einstein es la ocupación macroscópica del estado base de una partícula, en tanto que el gas degenerado de Fermi, poniendo de manifiesto el principio de exclusión de Pauli, es la ocupación de todos los estados de una partícula hasta una energía máxima, denominada Energía de Fermi. Es importante señalar que ambos estados macroscópicos corresponden a gases homogéneos de partículas ideales. Sin embargo, la situación realista en un laboratorio es que los átomos se encuentran confinados en potenciales inhomogéneos de tipo armónico y que las interacciones más relevantes son entre pares de átomos, debido a que los gases ultrafríos son muy diluidos. El llamado potencial de tipo armónico se refiere a la energía efectiva que los átomos experimentan como consecuencia de la presencia de campos magnéticos y ópticos, estos campos limitan el movimiento de los átomos a una región del espacio, siendo esa energía similar a la de una partícula de masa  $m$  moviéndose en un potencial de oscilador armónico  $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ , con  $p$  el momento de la partícula y  $r$  la distancia medida con respecto al centro de la región en la que se confinan los átomos.

Quizás el éxito mayor de lograr la condensación de Bose y el gas de-

generado de Fermi es la capacidad de “observar” la materia en el régimen cuántico, al tiempo que se puede tener *control* de las interacciones entre los componentes elementales que la integran. El control anterior se refiere a dos aspectos. Por un lado, es posible delimitar el espacio y dimensión en la que los átomos se mueven y, por otro, es posible modular la magnitud de sus interacciones. Dado que los átomos ultrafríos exhiben un comportamiento regido por las leyes de la mecánica cuántica, la forma en la que se consigue manipular el movimiento y las interacciones entre sus componentes es precisamente empleando el mismo canal de comunicación utilizado para producir muestras macroscópicas de átomos ultrafríos: radiación electromagnética resonante con las frecuencias de los átomos que integran el gas diluido. Por ejemplo para el caso de litio dicha frecuencia es  $\lambda = 670 \times 10^{-9}$  m.



**Figura 37.2:** Figura ilustrativa de átomos ultrafríos confinados en 3, 2 y 1 dimensión. Las flechas rojas indican las direcciones en las que deben orientarse los haces de luz láser para conseguir que el movimiento de los átomos sea limitado en las direcciones  $x$ ,  $y$  y  $z$ . Típicamente las densidades atómicas son mayores en el origen que hacia la parte externa de la nube como se muestra en forma esquemática en la esfera, disco y nube en 1D.

Una forma de controlar la dimensión efectiva en la que los átomos se mueven es variando el orden de magnitud de la frecuencia de la trampa armónica originalmente isotrópica. Ello da lugar a que en la dirección o direcciones en las que la frecuencia aumenta el movimiento se ve drásticamente reducido. Así, en lugar de que los átomos se muevan en las tres direcciones espaciales, su movimiento ocurrirá en la dirección o direcciones en la que la frecuencia es menor. En la figura 37.2 se ilustra el espacio efecti-

vo en el que se mueven los átomos del gas ultrafrío. En la práctica, valores típicos de las frecuencias de confinamiento oscilan en cientos de Hertz.

Respecto al tipo de potencial de confinamiento en el que se desarrolla la dinámica del gas, éste es el resultado de aprovechar la energía que adquiere un átomo neutro en presencia de un campo eléctrico. Dicha energía es proporcional al producto entre el campo eléctrico y el dipolo que se induce en los átomos neutros. Así, el conjunto de átomos se mueve bajo la influencia de un potencial dipolar. Es de especial interés la construcción de potenciales periódicos en el sentido que átomos neutros moviéndose en dichos potenciales son el análogo de electrones moviéndose en sólidos cristalinos. La superposición de campos de luz láser que se propagan en sentido contrario permite diseñar las llamadas redes ópticas en 1, 2 y 3 dimensiones. Sólo hace falta un ingrediente más, las interacciones entre partículas. El control de las mismas se realiza a través de las llamadas resonancias de Feshbach, que ocurren cuando de forma externa es posible sintonizar la energía y el potencial de interacción de dos átomos que sufren una colisión a bajas energías.

De esta forma es posible, a través del uso de campos externos, recrear escenarios en los que átomos ultrafríos se mueven en forma análoga a electrones en la materia, conservando sus propiedades cuánticas de muchos cuerpos.

#### SUPERCONDUCTORES CONVENCIONALES Y DE ALTA TEMPERATURA

El fenómeno de SC descubierto en 1911 fue explicado por Bardeen, Cooper y Schrieffer en la llamada “Teoría de la Superconductividad” en un artículo publicado en 1957 [3]. Su teoría, conocida como BCS, se basa en dos aspectos cruciales, uno que involucra la física de los portadores de carga y otro relacionado con la forma en la que se comporta colectivamente la materia constituida por esos portadores. Técnicamente, esos dos ingredientes esenciales se identifican como los pares de Cooper y como la función de onda de muchos cuerpos. El par de Cooper está formado por dos electrones con espín opuesto, siendo estos electrones pertenecientes a la llamada banda de energía centrada en la energía de Fermi. Sin embargo, este par de electrones estrictamente hablando no están ligados. Así, los constituyentes elementales o portadores de carga de los superconductores son pares de partículas con carga  $2e$ , cuyas proyecciones de espín son  $\frac{\hbar}{2}$  y  $-\frac{\hbar}{2}$ . Refiriéndonos ahora al otro ingrediente de la teoría BCS, la función de onda es la superposición de todos los posibles pares asociados al estado de menor

energía. El espectro de excitaciones de dicho estado se caracteriza por la presencia de una brecha o *gap* de energía, el cual es una cantidad que por encima de la temperatura crítica es igual a cero y diferente de cero por debajo de la misma. Justamente esta cantidad es el parámetro de orden referido en la primera sección. A los superconductores que obedecen la teoría BCS se les denomina convencionales.

El entendimiento de la SC no culminó en 1957 debido a que en 1986 se descubrió un nuevo fenómeno que hasta el momento no ha sido entendido, la llamada SC de alta temperatura, encontrada por Bednorz y Müller en materiales cerámicos (también denominados cupratos por su composición a base de cobre, YBaCuO) a una temperatura superior a los 90 K. A la fecha se conoce gran diversidad de compuestos que exhiben este fenómeno; de hecho, la temperatura crítica más alta reportada para aleaciones de bario y cobre se encuentra entre 133–138 K. Si bien a través del estudio fenomenológico de los SC de alta temperatura se conoce su comportamiento, estos materiales no solo no pueden ser descritos por la teoría BCS, sino que no hay una teoría que permita entenderlos. Aunque se sabe que los portadores de carga también son pares de electrones, se desconoce el mecanismo de apareamiento de los mismos, el cual está bien entendido para los SC de baja temperatura de transición [4].

Dada la analogía entre los SF y los SC, se especula que el entendimiento de los átomos ultrafríos, que también son superfluidos, abre un panorama para acceder al entendimiento de los SC de alta temperatura. Así, el simular la materia en el régimen cuántico, ya sea a través modelos teóricos o mediante su implementación controlada en un laboratorio, son dos valiosas herramientas que van de la mano en el objetivo de entender las transiciones de fase a los estados SF y SC de alta temperatura. Del lado teórico se pueden predecir fenómenos susceptibles de ser medidos en el laboratorio, y viceversa, la contraparte experimental permite delinear el modelo teórico pertinente para describir la física dentro de un laboratorio.

#### REFERENCIAS

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews y col., «Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor», *Science*, vol. 269, n.º 5221, págs. 198-201, jul. de 1995.
- [2] B. DeMarco y D. S. Jin, «Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas», *Science*, vol. 285, n.º 5434, págs. 1703-1706, sep. de 1999.

- [3] J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer, «Theory of Superconductivity», *Physical Review*, vol. 108, n.º 5, págs. 1175-1204, dic. de 1957.
- [4] A. J. Leggett, «What DO we know about high T<sub>c</sub>?», *Nature Physics*, vol. 2, n.º 3, págs. 134-136, mar. de 2006.



## ESTADOS LIGADOS EN LAS ENERGÍAS DEL CONTINUO: OTRA CLASE DE ESTADOS LIGADOS

*Enriqueta Hernández\**  
*Alfonso Mondragón<sup>†</sup>*

Los estados ligados en las energías del continuo  $E > 0$ , conocidos como BICs, son una parte muy interesante e importante del espectro de energías de un sistema cuántico. Estos estados se manifiestan en diferentes fenómenos de la física y son el resultado de mecanismos de confinamiento fundamentalmente muy diferentes a los de los estados ligados convencionales. Su evidencia experimental ha sido ampliamente verificada en guías de onda en óptica, como se ilustra con un ejemplo en este escrito, y también en estructuras en núcleos en la línea de goteo de neutrones. En la teoría de las resonancias se han estudiado mediante un modelo de canales acoplados y otros métodos de cálculo. En este trabajo presentamos una descripción breve de estos estados y algunos mecanismos de confinamiento que los generan. En la última parte damos una descripción de los modos atrapados en guías de ondas acústicas y un ejemplo de estos modos que podemos considerar como uno de los análogos clásicos de los BICs.

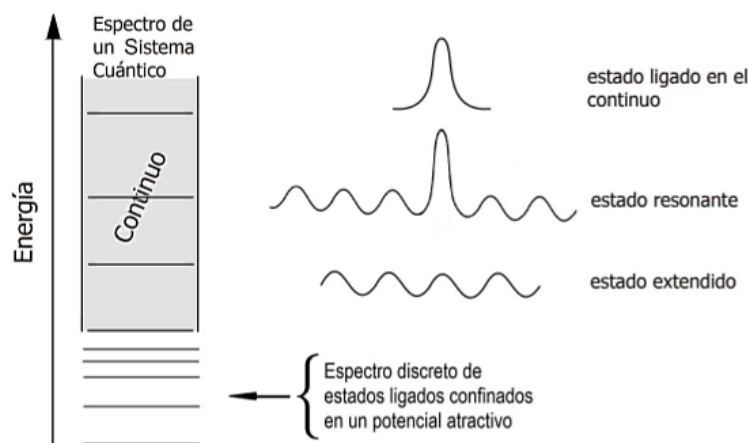
En 1929, J. von Neumann y E. Wigner construyeron un estado ligado con energía positiva  $E > 0$ . Este estado es un estado propio de la ecuación de Schrödinger, localizado en el espacio y descrito por una función cuadrado integrable. El Método de von Neumann-Wigner se formuló basado en la suposición de la existencia de una función de onda (estado extendido) con una envolvente que decae en el espacio y para ello se adaptó un potencial para que el modo propio fuera la función de onda propuesta y

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

<sup>†</sup>Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México. 14 de marzo de 1932 – 8 de junio de 2020.

así obtuvieron la forma del potencial local necesario para generar el estado ligado con energía positiva (BIC). En 1974, F. H. Stillinger y T. A. Weber sugirieron que los BICs se podrían encontrar en ciertos sistemas atómicos y moleculares. Posteriormente F. H. Stillinger y D. R. Herrick propusieron el uso de un arreglo tridimensional de átomos para construir potenciales que pudieran sostener BICs [1]. Experimentos con estructuras de semiconductores realizados en 1992 por F. Capasso y colaboradores, proporcionaron la observación directa de estados electrónicos ligados por encima de un pozo de potencial en estas estructuras y localizados por medio de interferencia difractiva [1]. Los BICs son en general un fenómeno de ondas, que se ha observado en guías de ondas cuánticas, guías de ondas ópticas, ondas electromagnéticas, ondas elásticas en sólidos [1], ondas acústicas y ondas en agua [2]. Ahora surge una pregunta ¿Cómo podemos saber si existe un BIC? Una manera de saber si existe un estado ligado con  $E > 0$  en un sistema cuántico abierto es observar sus energías, vease la figura 38.1. Si la energía está en el rango espectral de energías del continuo puede existir un BIC, pero si está fuera de este rango espectral de energías entonces solo puede haber un estado ligado convencional. Como se mencionó, los BICs se encuentran en diferentes áreas de la física, por ejemplo en sistemas ópticos, moleculares, atómicos, nucleares y otros sistemas; éstos son producidos por mecanismos de confinamiento muy diferentes de los que producen a los estados ligados convencionales [1, 3].



**Figura 38.1:** Espectro de la energía de un sistema cuántico.

## EN UN SISTEMA CUÁNTICO ¿QUÉ SON LOS BICs?

Para contestar esta pregunta, veamos la estructura general de un sistema cuántico representado por un Hamiltoniano con un potencial finito. El espectro de un sistema cuántico consiste de estados ligados, los cuales son localizados y normalizables, y de estados no ligados los cuales son extendidos y no-normalizables.

El espectro de la energía que se muestra en la figura 38.1 consiste de un sector continuo de estados, que corresponden a estados espacialmente extendidos y de un sector de niveles discretos, que corresponden a los estados ligados que no decaen. Los estados extendidos existen en un rango de energías del continuo. Por debajo de este continuo se encuentran los niveles discretos de estados ligados convencionales que no radían, por ejemplo los estados ligados del electrón en el átomo de Hidrógeno. En el continuo se encuentran también las resonancias que son estados que se acoplan a ondas extendidas y tienen una energía compleja  $E = \mathcal{E} - i(1/2)\Gamma$ , la parte imaginaria está relacionada con el tiempo de vida de estos estados. Adicionalmente a los estados resonantes y a otros estados extendidos hay algunos estados del continuo, que tienen energía real y positiva si el potencial se anula en infinito, vease la figura 38.1. Estos estados son llamados BICs en la literatura científica, por sus siglas en inglés.

## ¿CÓMO SE GENERÓ EL BIC DE VON NEUMANN-WIGNER?

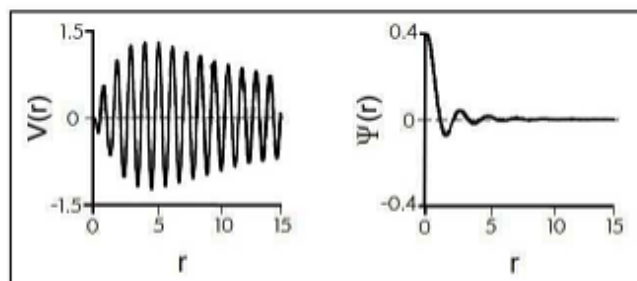
El primer estado ligado  $\Psi$  en las energías del continuo  $E > 0$ , propuesto por von Neumann y Wigner en 1929, se basó en la construcción de un potencial  $V$  que pudiera sostener este estado ligado para energías positivas.

El correspondiente potencial  $V$  se puede determinar reescribiendo la ecuación de Schrödinger en la forma

$$V = E + \frac{\nabla^2 \Psi}{2\Psi}. \quad (38.1)$$

$\Psi$  y  $E$  se escogen apropiadamente para que el potencial resultante se anule en infinito, pueda sostener el estado ligado en el continuo y esté bien definido en todas partes. La solución de von Neumann y Wigner se obtuvo suponiendo una función de onda extendida con una envolvente de la forma  $f(r) = [A^2 + (2kr - \sin(2kr))^2]^{-1}$ , en donde  $A$  es una constante y  $k$  el número de onda. Este BIC tiene una energía  $E = (1/2)k^2$  en el continuo con  $E > 0$ . En la figura 38.2 se muestran la función de onda del BIC y el poten-

cial  $V(r)$ , tanto el potencial como la función de onda oscilan en el espacio y decaen como una ley de potencias [1].



**Figura 38.2:** En esta figura se muestran la función de onda  $\Psi(r)$  que representa el BIC y el potencial local  $V(r)$  que lo sostiene [1].

¿SE PUEDEN CONSTRUIR BICs EN OTROS SISTEMAS EN ANALOGÍA AL BIC DE VON NEUMANN-WIGNER?

La respuesta a esa pregunta es sí, en sistemas con simetría a través de una reflexión en el espacio o simetría de paridad  $P$  e inversión en el tiempo  $T$ , conocida como "simetría  $PT$ ". El concepto de la simetría  $PT$  está basado en los trabajos de C. Bender y colaboradores de 1998 y 2002, en los cuales demostraron que Hamiltonianos no-Hermitianos pueden mostrar un espectro de valores propios puramente real, asumiendo que el sistema es simétrico respecto a las operaciones  $PT$ . Una demostración muy clara entre la simetría  $PT$  y la energía positiva de los espectros fue ilustrada por Bender en el problema del oscilador armónico más un término de potencial imaginario ( $ix$ ), esto es,  $H = p^2 + x^2 + (ix)$ . Este Hamiltoniano no es Hermitiano pero es simétrico con respecto a las operaciones de  $PT$  y tiene un espectro real y positivo  $E_n = 2n + 5/4$ . Para un sistema unidimensional este requerimiento conduce a la condición de que la parte imaginaria del término del potencial en el Hamiltoniano debe ser una función impar, mientras que la parte real es par. En un sistema con simetría  $PT$  los efectos de ganancia y pérdida de simetría se pueden desequilibrar, dando lugar a una dinámica limitada. El sistema así descrito, puede experimentar un rompimiento espontáneo de la simetría  $PT$  de una fase en donde todos los valores propios del Hamiltoniano son reales, a una fase rota en donde al menos dos son complejos, cuando se varía en el sistema el parámetro de

ganancia/pérdida.

En el caso de la óptica los requerimientos de simetría  $PT$  conducen a la condición que la parte real del índice de refracción debe ser una función par, mientras la parte imaginaria es una función impar en el espacio. En 2014, M. I. Molina y Y. S. Kivshar [4] consideraron la propagación de luz en un arreglo unidimensional de guías de ondas binarias, como el que se muestra en la figura 38.3, con pérdida y ganancia balanceada, el cual satisface las condiciones de simetría  $PT$ . En este arreglo  $j = 1, 2, \dots, n$  es el número de las guías de ondas,  $a_j$  y  $b_j$  son las amplitudes de los modos en la guías de ondas y  $V_1, V_2$  son los coeficientes de acoplamiento. Ellos resolvieron las ecuaciones dinámicas para este arreglo proponiendo como solución un modo de Floquet-Block y de esta forma construyeron un modo propio localizado con una energía propia dentro de alguna de las bandas permitidas de la red binaria.

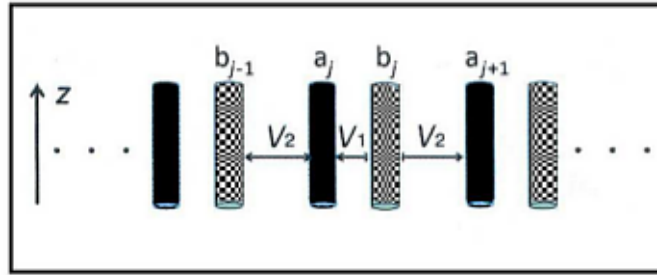


Figura 38.3: Esquema de un arreglo binario de guías de ondas [4].

Estos investigadores siguieron el mismo procedimiento que von Neumann y Wigner para construir un estado ligado en el continuo de la energía y el potencial que lo sostiene. Para ello seleccionaron un estado propio  $\phi_n$ , con valor propio  $\lambda^0$  y procedieron a modular su envolvente de tal manera que la onda así modulada fuera un estado propio del sistema inhomogéneo con valor propio  $\lambda^0$ . Ellos escribieron el BIC como  $C_n = \phi_n^0 f_n$ , en donde  $f_n$  es la envolvente, la cual es una función normalizada que decae como  $f_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$  y para asegurarse de que este estado fuera un estado propio del sistema usaron un potencial local  $\epsilon_n$ , cuya forma fue ajustada hasta lograrlo. El BIC modulado se muestra en la figura 38.4. La función envolvente  $f_n$  encontrada lleva el sistema de una fase con simetría  $PT$  a una fase Hermítica.

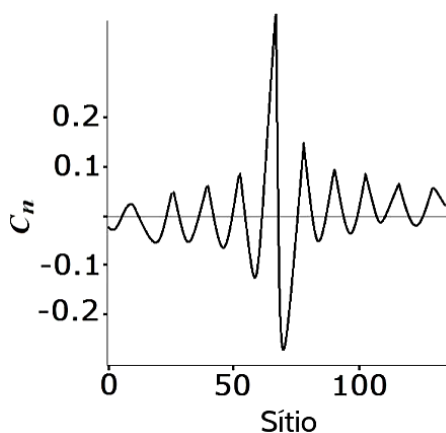


Figura 38.4: Estado ligado en el continuo [4].

#### BICS EN LA TEORÍA DE LAS RESONANCIAS ATÓMICAS Y NUCLEARES

Otra aproximación para construir potenciales que puedan sostener BICs se presentó después de la formulación de la teoría de las resonancias por Feshbach [3, 5]. Los estados resonantes son estados localizados en el espacio con un tiempo de vida finito, por lo tanto eventualmente decaen, tienen energía compleja y son construidos de estados del continuo, vease la figura 38.1. Los estados resonantes describen en general a los estados excitados de un núcleo o de un átomo. Un estado excitado de un núcleo tiene la opción de decaer de varias formas a estados de más baja energía, a los cuales puede acceder por emisión de rayos gama [6], o bien, mediante la fragmentación en núcleos más ligeros [3, 6]. Por ejemplo, el estado excitado de energía  $E = 4.56$  MeV en el núcleo de  $O^{17}$  puede decaer a alguno de los cuatro niveles más bajos de energía emitiendo neutrones o rayos gama [6]. Cada modo de decaimiento corresponde a un canal de fragmentación. Bajo algunos parámetros específicos de la interacción nuclear, la interferencia entre estados resonantes que se forman en canales diferentes puede dar lugar a una resonancia de ancho cero [3, 7] que resulta en un estado que no decae; esto es un BIC. En otros casos, la interacción sostiene directamente estados ligados en el continuo. El método de canales acoplados [5] es una herramienta matemática muy poderosa para describir colisiones de sistemas nucleares en los que ocurren procesos de dispersión de núcleos [6] o formación de nuevos sistemas que posteriormente se desintegran a través de diferentes mecanismos de decaimiento [3, 6].

Para ilustrar la existencia de BICs en la teoría de las resonancias describiremos brevemente el ejemplo desarrollado por L. Fonda y R. Newton [7], de un núcleo excitado que se fragmenta a través de dos modos de decaimiento, en donde cada modo corresponde a un canal. En este caso tenemos un sistema nuclear de dos canales acoplados, con momento angular  $\ell = 0$  y números de onda  $k_1$  y  $k_2$  en los canales 1 y 2, respectivamente, el cual nos permitirá describir el decaimiento o desintegración del núcleo excitado. La interacción  $V$  en este sistema es una matriz de dos dimensiones. El potencial  $V_{11}$  del canal 1 se representa por un pozo cuadrado, el potencial  $V_{22}$  del canal 2 es otro pozo cuadrado. Estos dos canales están acoplados por el potencial  $V_{12} = V_{21}$  que también es de la forma de un pozo cuadrado. Los tres potenciales son reales y tienen el mismo alcance  $r_0$ , para más claridad en la explicación se llama  $\beta$  al canal 1 y  $\alpha$  al canal 2 e inicialmente se considera abierto al canal  $\beta$ . La ecuación de Schödinger para este sistema es

$$H_\alpha(E_\beta)u_n = A_n(E_\beta)u_n, \quad (38.2)$$

$H_\alpha(E_\beta)$  es el Hamiltoniano del canal  $\alpha$ ,  $u_n$  sus vectores propios y  $A_n$  son los valores propios que forman el espectro de  $H_\alpha(E_\beta)$ . Para calcular los valores propios  $A_n$  se escribe esta ecuación como una ecuación integrodiferencial. La ecuación integrodiferencial se resuelve para  $r < r_0$  y  $r > r_0$ . Las condiciones de continuidad de las soluciones y su derivada logarítmica conducen a tres ecuaciones, dos de ellas coinciden en la ecuación cuadrática

$$(c^2 - K_1^2)(c^2 - K_2^2) - 4\mu_1\mu_2V_{12}^2/\hbar^4 = 0, \quad (38.3)$$

en esta expresión  $\mu_1$  y  $\mu_2$  son las masas reducidas en los canales  $\beta$  y  $\alpha$  respectivamente.  $K_1^2 = k_1^2 - 2\mu_1V_{11}/\hbar^2$  y  $K_2^2 = k_2^2 - 2\mu_2V_{22}/\hbar^2$  son los cuadrados de los números de onda.

La tercera ecuación es

$$\begin{aligned} i\rho_1(\alpha_1C_1 - \alpha_2C_2) + i\rho_2(\alpha_1C_2 - \alpha_2C_1) \\ -(\alpha_1 - \alpha_2)(\rho_1\rho_2 - C_1C_2) = 0, \end{aligned} \quad (38.4)$$

con  $C_1 = e_1 \cot e_1$ ,  $C_2 = e_2 \cot e_2$ ,  $\alpha_1 = K_2^2 r_0^2 - e_2^2$ ,  $\alpha_2 = K_1^2 r_0^2 - e_1^2$ , en estas ecuaciones  $e_1$ ,  $e_2$  son las soluciones de la ecuación cuadrática y  $\rho_1 = k_1 r_0$ ,  $\rho_2 = k_2 r_0$ .

Los valores propios discretos  $A_n(E_\beta)$  del Hamiltoniano  $H_\alpha(E_\beta)$  se obtienen de las soluciones  $\rho_2$  de la ecuación (38.4) que se encuentran en el semiplano superior del plano complejo del número de onda del canal  $\beta$ :

$$A_n = \hbar^2 \rho_2^2 / 2\mu_2 r_0^2. \quad (38.5)$$

Sin embargo, las soluciones  $\rho_2$  de la ecuación (38.4) no deben tener ceros en el cuadrante superior derecho, porque para  $\text{Im}(E_\beta) > 0$ , un pequeño cambio de la parte Hermitiana de  $H_\alpha(E_\beta)$  es negativo semidefinido. Cualquier cero de (38.4) cercano al eje imaginario positivo significa una resonancia muy estrecha en el canal  $\beta$ . Los ceros de (38.4) que con una elección adecuada de los potenciales se puedan ubicar muy cerca del eje imaginario al variar levemente los parámetros de los potenciales que los sostienen, conducen a ceros imaginarios positivos y así a estados ligados en el continuo. L. Fonda y R. Newton [7] encontraron que un estado ligado en el continuo, solución de la ecuación (38.4), puede existir solo si la fuerza nuclear en el canal  $\alpha$  desacoplado ( $V_{12} = V_{21} = 0$ ) es lo suficientemente fuerte para producirlo. Una discusión muy detallada sobre los ceros de la ecuación (38.4), que pueden dar lugar a estados ligados en el continuo con  $E > 0$ , estados ligados ordinarios o bien a estados resonantes en un sistema de varios canales acoplados se puede consultar en [7].

Los BICs en reacciones nucleares han sido estudiados y medidos para los espectros de muchos núcleos [8]. Los BICs en sistemas atómicos han sido estudiados en excitaciones de uno y de varios fotones en un modelo de canales acoplados [1].

#### TRANSFORMACIONES DE DARBOUX COMPLETAMENTE DEGENERADAS Y LOS BICs

Un método muy poderoso para construir BICs es el método de las transformaciones de Darboux. Una variedad de Hamiltonianos exactamente solubles del tipo de von Neumann-Wigner que sostienen un BIC se pueden construir por medio de una transformación de Darboux ( $TD$ ), a partir de las funciones propias de la energía  $\phi_\lambda$  de algún Hamiltoniano inicial  $H_0$  como el de una partícula libre. Consideremos la ecuación radial de Schrödinger independiente del tiempo con el Hamiltoniano inicial  $H_0$ , la  $TD$  de la solución  $\phi_\lambda$  de  $H_0$ , con valor propio  $\lambda$ , está dada por el cambio

$$\phi_\lambda \rightarrow \psi_\lambda[1] = \frac{W(\phi_\mu, \phi_\lambda)}{\phi_\mu(r)} \quad \text{con} \quad V_0 \rightarrow V[1](r) = V_0 - 2 \frac{d^2}{dr^2} \ln \phi_\mu(r), \quad (38.6)$$

donde  $W(\phi_\mu, \phi_\lambda)$  es el Wronskiano de las funciones  $\phi_\mu$  y  $\phi_\lambda$ . La ecuación de Schrödinger es covariante bajo la transformación dada en las ecuaciones (38.6). Es decir, la función  $\psi_\lambda[1]$  satisface la ecuación radial de Schrödinger con el nuevo potencial  $V[1]$ . La función propia  $\phi_\mu$  del Hamiltoniano inicial  $H_0$  se conoce como función de transformación, no tiene nodos y cumple con



la ecuación de Schrödinger para el potencial  $V_0$  con valor propio  $\mu$ . La  $TD$  se puede iterar  $N$  veces y la generalización se conoce como teorema de Crum [9]. Este método nos permite construir la función propia de la energía  $\psi_E[N]$  para la ecuación de Schrödinger con un potencial  $V[N]$ , con valor propio  $E$ . Los potenciales  $V_0$  y  $V[N]$  tienen el mismo espectro de energía, a excepción de los valores propios  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_N$  que corresponden a las funciones de transformación usadas en la iteración.

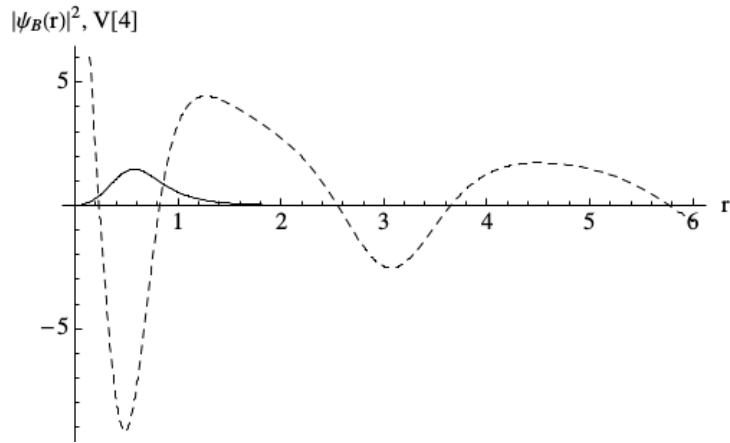
La  $TD$  completamente degenerada se obtiene cuando las funciones de transformación son degeneradas en un continuo de los valores propios de  $H_0$ . La forma explícita de la transformación se obtiene tomando todas las funciones de transformación muy cercanas en sus valores de energía, esto es,

$$\phi_1 = \phi(r, q) \text{ y } \phi_k(r, q + \alpha_k), \quad k = 2, 3, \dots, k \quad (38.7)$$

con  $\alpha_k \ll q$  para toda  $k$ . Las funciones de transformación se desarrollan en una serie de potencias de  $\alpha_k$  y las expresiones resultantes se substituyen en los Wronskianos de la transformación. Finalmente, se usan las propiedades de los Wronskianos en el límite en el que  $\alpha_k$  se anula y de esta forma se obtienen las expresiones para la función de onda  $\psi_E[N]$  y el correspondiente potencial  $V[N]$  [1].

En 2011, A. A. Adrianov y A. V. Sokolov generaron un estado ligado en las energías del continuo, por medio de una  $TD$  dos veces iterada y completamente degenerada, el cual es una solución de la ecuación de Schrödinger. En 2017, E. Hernández y colaboradores [10], usaron una  $TD$  cuatro veces iterada y completamente degenerada para producir dos BICs, los cuales al variar los parámetros del potencial  $V[4]$ , se degeneran en un valor de la energía del espectro continuo del Hamiltoniano  $H[4]$  y dan lugar a otro BIC, que está asociado a una singularidad espectral particular del Hamiltoniano  $H[4]$ .

En la figura 38.5, se muestra con una línea de rayas el potencial oscilante del tipo de von Neumann y Wigner que se obtiene mediante una transformación de Darboux cuatro veces iterada. El potencial oscila con una amplitud que decrece como  $r^{-1}$ , en el origen toma el valor 19.55 y el máximo de la primera oscilación está a una altura de 4.43. Con una línea continua, se muestra la densidad de probabilidad del BIC como función de la distancia  $r$ , el BIC está confinado principalmente en el primer pozo del potencial oscilante.



**Figura 38.5:** BIC obtenido de la fusión de dos BICs en las energías del continuo en donde  $E > 0$ . La línea de rayas corresponde al potencial  $V[4]$ .

#### MODOS ATRAPADOS E INCRUSTADOS EN UNA GUÍA DE ONDAS EN ACÚSTICA

Estos modos atrapados son oscilaciones localizadas que evolucionan temporalmente dentro de un medio que tiene una dimensión espacial. La existencia de modos atrapados en guías de ondas acústicas, localmente perturbadas, fue primeramente observada por R. Parker en 1966 y el primer cálculo teórico de frecuencias de resonancias se hizo dos años después en 1968 y desde entonces se han estudiado muchos ejemplos [2].

En esta sección damos una breve descripción de estos modos. Para ello consideremos oscilaciones temporales armónicas, con frecuencia angular  $\omega$ , y se omitirá la dependencia temporal de la forma  $\exp(-i\omega t)$ , para que las fluctuaciones de presión en la guía  $\phi$  satisfagan la ecuación de Helmholtz

$$\nabla^2 \phi + k^2 \phi = 0, \quad (38.8)$$

sujeta a las condiciones a la frontera apropiadas. Un modo atrapado o resonancia acústica, tiene energía finita y corresponde a una solución de la ecuación (38.8). En esta ecuación,  $k^2$  es el valor propio del operador  $-\nabla^2$  con las condiciones a la frontera. El valor positivo de  $k$  está relacionado con la frecuencia del modo atrapado para el cual existe la solución a través de la ecuación  $k = \omega/c$ , en la cual  $c$  es la velocidad del sonido.

La misma formulación matemática se usa en el estudio de canales de ondas de agua de profundidad constante, es decir, con una perturbación

que no varíe con la profundidad, así fue como se descubrieron los modos de Parker en 1966.

Un modo atrapado en el continuo de una guía de ondas

Un ejemplo de un valor propio encastrado en una guía de ondas fue construido por D. S. Jones en 1953. Para ilustrar este tipo de modos consideremos el dominio semi-infinito de dos dimensiones  $\{x > 0, 0 < y < 1\}$  con condiciones a la frontera de Dirichlet en  $y = 0$  y  $y = 1$ . Si la condición a la frontera en  $x = 0$  es  $\phi = 0$  o  $\partial\phi/\partial x = 0$ , entonces el espectro de  $-\nabla^2$  es puramente continuo. Sin embargo, si la condición a la frontera es  $\partial\phi/\partial x + \sigma\phi = 0$ , entonces hay dos posibles soluciones para la ecuación  $-\nabla^2\phi = \lambda\phi$ , las soluciones son:

$$\begin{aligned}\phi &= (\mu \cos \mu x - \sigma \operatorname{sen} \mu x) \operatorname{sen} \pi y, & \lambda &> \pi^2 \\ \phi &= e^{-\sigma x} \operatorname{sen} 2\pi y, & \lambda &= 4\pi^2 - \sigma^2\end{aligned}\quad (38.9)$$

en donde  $\mu = (\lambda - \pi^2)^{1/2}$  y  $\sigma$  es una constante.

En 1998, R. Weder y P. Werner encontraron un valor propio encastrado en el espectro continuo para  $0 < \sigma < \pi\sqrt{3}$  en la perturbación de una semitira [2].

En los ejemplos presentados en este escrito hemos dado una breve descripción de los estados ligados que tienen lugar en las energías del continuo  $E > 0$  de un sistema cuántico y hemos mostrado mediante una transformación de Darboux como generar estos estados. Presentamos algunos análogos clásicos en óptica y en acústica, así como algunos mecanismos de confinamiento que los generan.

La importancia de estudiar los estados ligados del continuo radica en un mejor entendimiento de los espectros moleculares, atómicos y nucleares, y de esta forma conocer mejor la dinámica en las moléculas, átomos y núcleos y en algunos casos su aplicación en otras áreas del conocimiento.

#### ACRÓNIMOS

- **BIC:** Estado ligado encastrado en las energías del espectro continuo.
- **TD:** Transformación de Darboux.

## REFERENCIAS

- [1] C. W. Hsu, B. Zhen, A. D. Stone y col., «Bound states in the continuum», *Nature Reviews Materials*, vol. 1, n.º 9, págs. 1-13, jul. de 2016.
- [2] C. M. Linton y P. McIver, «Embedded trapped modes in water waves and acoustics», *Wave Motion*, Special Issue on Localization of Wave Motion, vol. 45, n.º 1, págs. 16-29, nov. de 2007.
- [3] N. Moiseyev, *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.
- [4] M. I. Molina e Y. S. Kivshar, «Embedded States in the Continuum for PT-Symmetric Systems», *Studies in Applied Mathematics*, vol. 133, n.º 3, págs. 337-350, 2014.
- [5] I. E. McCarthy, «Formal Scattering Theory», en *Introduction to nuclear theory*, New York: John Wiley & Sons, 1968.
- [6] B. L. Cohen, *Concepts of nuclear physics*. New York: McGraw-Hill, 1971.
- [7] L. Fonda y R. G. Newton, «Theory of resonance reactions», *Annals of Physics*, vol. 10, n.º 4, págs. 490-515, ago. de 1960.
- [8] K. Katō, T. Myo, S. Aoyama y K. Ikeda, «Structure of Continuum States in Neutron Drip-Line Nuclei», en *Resonances in Few-Body Systems*, A. T. Kruppa y R. G. Lovas, eds., ép. Few Body Systems, Vienna: Springer, 2002, págs. 96-104.
- [9] V. B. Matveev y M. A. Salle, *Darboux Transformations and Solitons*, Soft-cover reprint of the original 1st ed. 1991 edition. S.l.: Springer, sep. de 1992.
- [10] E. Hernández, A. Jáuregui, D. Lohr y A. Mondragón, «Particular spectral singularity in the continuum energies: A manifestation as resonances», *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 50, n.º 26, jun. de 2017.

## VII

# ÁTOMOS, MOLÉCULAS Y NANOPARTÍCULAS



## ÁTOMOS Y MOLÉCULAS COMO SISTEMAS AISLADOS: EL PAPEL DE LOS QUÍMICOS

*Carlos F. Bunge\**

**Analizo el rol de los químicos en el progreso de la Teoría Atómica destacando lo que era factible y lo que rebasaba las posibilidades de cada época. La Mecánica Cuántica, las computadoras electrónicas, y el desarrollo de métodos, algoritmos y programas de cómputo dieron origen a la Química Cuántica. Esta permite la predicción de estructuras estables con grados variables de confiabilidad. Concluso mencionando logros y desafíos en el cálculo de las energías de los estados estacionarios de átomos y moléculas.**

Este es el primero de dos capítulos sobre átomos y moléculas como sistemas aislados, donde se destaca el papel de los químicos.

Hace más de 2 400 años, Demócrito de Abdera (c.-460, c.-370) o tal vez su maestro Leucipo, dió respuesta a una pregunta que estaba vigente entre algunos filósofos de su entorno: si se empieza con un cosa real, como un pedazo de gis, y se la parte en dos, y luego una de esas partes se la vuelve a partir en dos, y así sucesivamente, el proceso imaginario ¿llegará a un fin o continuará indefinidamente? La respuesta fue tajante: el proceso llegará a un fin cuando los últimos pedazos sean indivisibles, esto es, átomos.

Con base en esta respuesta y abundantes consideraciones empíricas, aunque no por medio de experimentos controlados, Epicuro (c.-341, c.-270) y sus discípulos fundaron una filosofía materialista con una ética humanista, recogidas ambas por Lucrecio (c.-98, c.-55) en *De Rerum Natura*. Esta obra hoy se lee como contemporánea, tanto por la importancia de los problemas que aborda y plantea, y que no han sido resueltos por la civilización occidental, como por su impacto en el desarrollo de la cultura universal.

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

Su primera impresión data de 1473. La conoció Niccolò Maquiavelli (1469–1527), y despertó curiosidad a través de los *Essais* (1580) de Michel de Montaigne (1533–1592) donde recibe más de 80 citas. Molière (1622–1673) la tradujo en verso. Hay una versión inglesa de 1640–1650, por Lucy Hutchinson (1620–1681), quien más tarde lamentaría haberla hecho. Iluminó a Denis Diderot (1713–1784), sirviendo de preámbulo a la Ilustración del siglo XVIII. Del otro lado del océano, Thomas Jefferson (1743–1826), quien tenía al menos 5 ediciones de la obra, fue el epicúreo más notable. Hoy, con excepción de un número significativo de físicos teóricos y matemáticos, casi la totalidad de los científicos ha adoptado el materialismo epicúreo, la mayoría de ellos sin saberlo.

#### ÁTOMOS Y MOLÉCULAS EN MANOS DE LOS QUÍMICOS

A principios del siglo XIII, Pseudo-Geber publicó una serie de tratados de alquimia en los que esbozó una teoría corpuscular de la materia, la que estaría formada de corpúsculos divisibles, en contraposición con los átomos indivisibles de Demócrito. En el siglo XVII, con el objetivo expreso de borrar el ateísmo epicúreo, René Descartes (1596–1650) y Pierre Gassendi (1592–1655) reinventaron, cada cual a su manera, una teoría corpuscular de la materia, de manera más precisa el primero, y más literaria el segundo, pero no por ello menos influyente, ya que su *Syntagma Philosophiæ Epicuri*, escrita en 1649, fue publicada de manera póstuma, en 1658.

En 1661, el alquimista, físico y teólogo Robert Boyle (1627–1691), publicó *The Sceptical Chymist* (hoy se dice *skeptical*, y *chymist* se traduce como alquimista). Luego de esta publicación, Boyle, quien ya gozaba de un bien ganado prestigio, no tuvo más remedio que considerarse un químico hecho y derecho. En su libro, después de advertir en el prólogo que “la búsqueda de la verdad de ninguna manera está reñida con la civilidad” (sic) empieza comentando que ni el sistema aristotélico de los cuatro elementos, ni el sistema de los tres principios de Paracelso, pueden explicar cómo, cuando un conjunto de sustancias es “atacado por el fuego o por solventes poderosos,” a menudo “se forman sustancias complejas” y no los prometidos productos “primitivos, simples y perfectamente puros.” ¡Qué sencillo y demolidor mazazo a los dogmas anteriores!

La segunda propuesta de Boyle era mucho más especulativa y peligrosa: los anglicanos no quemaban en la hoguera pero eran propensos a estrangulamiento con la soga. Evitando dar crédito a sus predecesores, Boyle formuló la idea de que los constituyentes últimos de las sustancias eran átomos, y que



los elementos estaban formados por átomos idénticos.

Boyle es justamente considerado el padre fundador de la Química. Tuvo la sabiduría de evitar el dogmatismo y las riñas estériles. Se le adjudica la importante noción de *trabajos en progreso* (proyectos de largo aliento) que fructificarían en la Teoría Atómica de Dalton siglo y medio después. Esta última fue factible gracias a estudios que requerían de mediciones que eran *imposibles* de llevar a cabo en 1661, cuando tampoco podían formularse las preguntas básicas sobre la composición de la materia. Isaac Newton (1642–1727) publicó su *Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica* en 1687, que pasó desapercibida entre los químicos, quienes aún hoy hablan de pesos (y no masas) atómicas.

#### SE INVENTA LA BALANZA ANALÍTICA

La química de gases, también llamada química neumática, fue iniciada por Jan Baptist van Helmont (1579–1644) quien desarrolló el arte del manejo de gases, luego perfeccionado por Stephen Hale (1677–1761), inventor de un dispositivo para recoger los gases producidos en reacciones químicas. Pero faltaba algo para impulsar los trabajos de Lavoisier y otros que hicieron posible la Teoría Atómica de Dalton: la balanza analítica.

Si bien las balanzas más antiguas datan de la época de las primeras grandes cosechas de cereales, hace más de 7 000 años, la balanza analítica, que permitió el desarrollo cuantitativo de la química del siglo XVIII, fue obra del estudiante Joseph Black (1728–1799) alrededor de 1750.

A pesar de su trágico final, el propio Antoine Lavoisier (1743–1794) se consideró un hombre de suerte, según sus últimas palabras antes de subir al cadalso. Heredó cuantiosas fortunas de madre y padre, todas sus inversiones fueron exitosas, y su afluencia económica le permitió formar el mejor laboratorio de química del siglo XVIII, importando para ello especialistas de diversos rincones de Europa. Se casó a los 28 años con Marie-Anne Pierrette Paulze (1758–1836), a quien más que doblaba en edad, pero no en inteligencia ni en belleza. Ella fue esencial para ordenar los trabajos en el laboratorio, documentar los equipos, como puede apreciarse en sus centenares de dibujos a lo largo de toda la obra de Lavoisier, y traducir del inglés una apreciable cantidad de publicaciones científicas a pedido de su marido.

El gran poder económico de Lavoisier le permitió invitar a París a importantes científicos extranjeros. Las succulentas comidas y bebidas con que estos fueron agasajados, sin duda debieron contribuir a que Lavoisier adquiriera una información privilegiada sobre la química de su tiempo.

La obra humanitaria de Lavoisier hacia los menos favorecidos se estima técnicamente correcta y socialmente efectiva. Sus investigaciones posteriores elucidaron el mecanismo de la combustión, de la respiración de las plantas, y de buena parte de la respiración animal, esto último truncado por el maremagnum que trajo la Revolución Francesa (1789). En su *Traité Élémentaire de Chimie* (1789), describe la descomposición y recomposición del agua con exactitud cuantitativa, lo que le indujo a enunciar su ley de conservación de la masa en reacciones químicas, además de establecer que el agua era un compuesto de dos elementos que no eran líquidos sino gaseosos: el hidrógeno y el oxígeno.

Los autores de la Wikipedia mencionan a Lomonosov y otros como predecesores de la mencionada ley, aunque ninguno de estos tuvo acceso a laboratorios con el equipo necesario para llevar a cabo los estudios cuantitativos requeridos. Hacia finales del siglo XX, la dirección de la entonces flamante *Cité des Sciences et de l'Industrie*, del parque de la Villette en París, organizó un grupo de químicos, físicos e ingenieros con la misión de reproducir los aparatos y resultados de Lavoisier para descomposición y recomposición del agua. El hecho de que este grupo selecto se tardara alrededor de 10 años en lograr su cometido, demuestra la capacidad, y la cantidad y calidad de los recursos utilizados por nuestro héroe.

Irónicamente, las grandes cantidades de calor desprendidas en los procesos de combustión, y que hacen posible la civilización dominante de nuestro planeta, se deben precisamente a una violación de la ley de conservación de la masa, pero estas desviaciones son tan pequeñas que la estequiometría no resulta afectada.

A pesar de que Jeremías Benjamín Richter (1762–1807) fue el padre de la estequiometría y de los pesos equivalentes (1792), y no obstante los trabajos de Lavoisier y otros en análisis de sustancias, el concepto de compuesto químico fue acreditado por Berzelius a Joseph Proust (1754–1826) en 1812, con toda justicia, por un trabajo publicado en 1794. Proust había afirmado claramente: todas las sustancias con composiciones definidas son compuestos, las demás son mezclas de compuestos.

Las motivaciones de los trabajos de John Dalton (1766–1844) en el período 1801–1807, que le llevaron a enunciar su Teoría Atómica en "*A New System of Chemical Philosophy*" (1808) permanece confusa y controvertida. Dalton no dió crédito a ninguno de sus antecesores ni a sus contemporáneos, de quienes sospechaba en todo. El análisis de sus cuadernos de laboratorio ha sugerido que la exactitud de sus resultados no corresponde ni a los protocolos ni a la calidad de los instrumentos utilizados. En otras pala-

bras, Dalton habría sabido de antemano adónde quería llegar y su trabajo de laboratorio habría sido un complemento necesario pero no decisivo.

La teoría de Dalton puede resumirse en 5 puntos:

1. Los elementos están hechos de pequeñísimas partículas llamadas átomos (Boyle, 1661). El físico Richard Feynman (1918–1988) consideraba que este es el conocimiento más importante para diseminar por el Cosmos.
2. Los átomos de un elemento dado son idénticos en tamaño, “peso” y otras propiedades. Los átomos de diferentes elementos difieren en sus propiedades (Boyle, 1661). Avogadro fue el primero en señalar que un gas estaba compuesto de moléculas y no necesariamente de átomos (1811), y en usar masa en vez de peso (1815) pero esto último fue ignorado. Aparte de los gases nobles, descubiertos hacia finales del siglo XIX, son muy pocos los gases compuestos de átomos libres.

Entre 1907 y 1913 se juntaron evidencias químicas y físicas de que los elementos poseían átomos de masas diferentes que ocupaban el mismo lugar de la Tabla de Mendeléyev. Frederick Soddy (1877–1956) los llamó isótopos (“en el mismo lugar” en griego) a sugerencia de Margaret Todd.

La radiactividad de algunos isótopos abrió nuevas oportunidades en medicina, particularmente para hacer imágenes radiológicas.

3. Los átomos no pueden subdividirse, ni crearse, ni destruirse (Demócrito c.-430, Boyle 1661).

En 1902 Soddy y Ernest Rutherford (1871–1937) descubrieron que los átomos de torio se descomponen espontáneamente en átomos de radio y núcleos de He, derrumbando la hipótesis de la indestructibilidad de los átomos de Demócrito, Boyle y Dalton. A pesar de la mayor estatura científica de Rutherford antes y después del trabajo en ciernes, se le concede a Soddy el mérito de haber comunicado a Rutherford la ruptura del átomo, quien con ello ganaba una vieja discusión con su discípulo.

Se piensa que los núcleos de H y He se habrían producido en los primeros tres minutos del Big Bang, si es que realmente éste tuvo lugar. Mucho más firme es la noción de que la mayoría de los átomos livianos se sintetiza por medio de reacciones nucleares en el interior de

estrellas, y que una pequeña contribución es aportada por las explosiones de supernovas, donde se formarían todos los átomos más allá del hierro.

En 1904 Rutherford utilizó el decaimiento del torio para sugerir que la antigüedad de un trozo de pechblenda era de 750 millones de años. Poco después, la edad de la Tierra fue acordada en 2 000 millones de años, valor que desde 1956 empezó a acercarse al resultado actual de 4 540 millones de años. Esto reivindicó la sospecha de Charles Darwin (1809–1882) de que la Tierra debería ser mucho más antigua que los 20–40 millones de años calculados por William Thomson (Lord Kelvin) (1824–1907). También estableció que el calor del interior de la Tierra es esencialmente debido a la radiactividad de la no despreciable cantidad de torio que contiene. El torio está distribuido de manera generosa por todo el planeta.

La nucleoelectricidad con reactores de torio contaminaría entre 300 y 1 000 veces menos que la obtenida con reactores basados en uranio, como lo ha divulgado activamente Carlo Rubbia, Premio Nobel de Física en 1984. ¿Por qué entonces se insiste con los reactores de uranio, con su peligro adicional de contribuir a la producción de armas nucleares, mientras que el torio tampoco sirve para construir estas armas de manera eficiente?

4. Los átomos de elementos diferentes pueden combinarse en relaciones simples de números enteros (insinuado por Richter, 1792, y justamente acreditado a Dalton, quien repitió muchas de las mediciones de Richter).

Sin embargo, la existencia de compuestos no estequiométricos, sobre todo entre los óxidos metálicos, ya había sido genuinamente prevista por Claude Louis Berthollet (1748–1822), un químico y político que vivió unos 50 años por delante de su tiempo, apresurándose a reconocer la importancia de la teoría de Dalton en 1812, ni bien Berzelius hubo santificado el concepto de compuesto de Proust.

5. En las reacciones químicas los átomos solamente se reordenan formando nuevos compuestos.

Todos los adelantos que siguieron a la Teoría Atómica de Dalton sirvieron para enriquecerla o para delimitar su dominio de validez a planetas relativamente fríos, como la Tierra. En conclusión, y contrariamente a las

fantasías extravagantes y nocivas de Thomas Kuhn (1922–1996), las grandes teorías *nunca* mueren: se enriquecen. Lo más que puede pasarles es que su dominio de aplicabilidad quede confinado dentro de límites menos amplios, como ocurrió con la Mecánica Newtoniana frente a la Mecánica Cuántica, y esta, a su vez frente a la Mecánica Cuántica Relativista, aún en etapa de desarrollo.

Dalton complementó su sistema de filosofía química con las primeras determinaciones de pesos atómicos. En 1802 Louis Joseph Gay-Lussac (1778–1850) ya había formulado su ley de expansión de los gases con la temperatura a presión constante: todos los gases tienen aproximadamente el mismo coeficiente de dilatación, dando crédito a las notas de laboratorio del polímata Jacques Charles (1746–1823). En el mismo año, Dalton había publicado algo parecido pero marcadamente menos prolijo.

En 1809, Gay-Lussac publicó su ley sobre la combinación de volúmenes de gases: volúmenes de distintos compuestos forman productos de manera que todos los volúmenes involucrados están en proporción de números enteros pequeños. Por ejemplo, un volumen de nitrógeno con tres volúmenes de hidrógeno forman dos volúmenes de amoníaco. En 1811, Amadeo Avogadro (1776–1856) interpretó la ley de combinación de volúmenes con su famosa hipótesis: volúmenes iguales de diferentes compuestos gaseosos tienen el mismo número de moléculas, en iguales condiciones de temperatura y presión; tenía todo para escribir  $pV = nRT$ , pero no lo hizo.

Por entonces, el juez supremo de la química era Jöns Jacob Berzelius (1779–1848), uno de los grandes químicos de todos los tiempos. Los mexicanos le debemos el reconocimiento a nuestro Andrés Manuel del Río Fernández (1764–1849) como descubridor del vanadio. Berzelius impugnaba la existencia de moléculas diatómicas de un solo elemento (que era fundamental para la ley de Avogadro), invocando su (falsa) teoría de que los átomos estaban cargados, y por lo tanto los átomos de un mismo elemento deberían repelerse. Y así fue como Avogadro cayó en el olvido.

Stanislao Cannizzaro (1826–1910) fue el gran protagonista del primer Congreso de Química en Karlsruhe, 1860, según cuenta el inspirado estudiante Dmitri Mendeléyev (1834–1907) en la carta que le escribió a su mecenas en San Petersburgo con motivo de la finalización del congreso. Gracias a la hipótesis de Avogadro, Cannizzaro pudo determinar pesos moleculares genuinos y por lo tanto también los primeros pesos atómicos confiables. A Cannizzaro le debemos, entre otras cosas, la primera fórmula correcta del agua:  $H_2O$ , en vez de  $OH$  adoptada desde Dalton. En su Italia natal, Cannizzaro sentó las bases de un sistema pionero de educación.

De regreso en San Petersburgo, Mendeléyev se avocó a determinar pesos atómicos de todos los elementos que pudo. En 1867 publicó su famosa Tabla Periódica de los Elementos, que años más tarde guiaría a Bohr en el desarrollo del concepto de estructura electrónica de los átomos.

#### NACIMIENTO DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

En el siguiente capítulo sobre el papel de los físicos nos ocupamos de qué están hechos los átomos, en particular de cómo Bohr inventó el concepto de estructura electrónica atómica y molecular. Poco después, Erwin Schrödinger (1887–1961) introdujo la Mecánica Cuántica Ondulatoria, con su famosa ecuación que predice las propiedades de los estados estacionarios representados por  $\Psi_\mu$  y sus energías  $E_\mu$  para átomos y moléculas:

$$H\Psi_\mu = E_\mu\Psi_\mu, \quad (39.1)$$

donde  $H$  es el operador hamiltoniano, que contiene una descripción muy general del átomo o de la molécula. En 1928, Paul Dirac (1902–1984) presentó una versión relativista de la ecuación (39.1) para átomos de un solo electrón, en que  $H$  es una matriz de  $4 \times 4$  por lo que  $\Psi_\mu$  es un vector de dimensión 4 cuyos elementos son a su vez funciones.

La ecuación de Dirac ha sido extendida de manera heurística a átomos y moléculas polielectrónicas. El hamiltoniano  $H$  contiene información sobre el nivel de la teoría utilizada (norelativista, relativista con diversos grados de aproximación), y los núcleos se consideran fijos o se mueven junto con los electrones. Si  $\Psi_\mu$  es cuadrado integrable y antisimétrica con respecto a cualquier permutación entre coordenadas electrónicas,  $E_\mu$  es la energía del sistema en el estado estacionario  $\Psi_\mu$ , con ciertas salvedades descritas en el siguiente capítulo.

La aproximación de Born-Oppenheimer (BO) permite desacoplar el rápido movimiento electrónico de las más lentas vibraciones de los masivos núcleos (1927). Dentro de la aproximación BO, una reacción química puede visualizarse ocurriendo a través de uno o más caminos de reacción definidos en una hipersuperficie de energía potencial como función de las coordenadas de cada átomo, a partir de la cual se pueden aproximar energías de activación, y aún probabilidades de evolución temporal por diversos caminos (mecanismos) de reacción.

El primer método general para aproximar las soluciones  $\Psi_\mu$  de la ecuación de Schrödinger fue inventado en 1928 por Douglas Hartree (1897–1958) quien simplificó la repulsión coulombiana entre los electrones me-

diante un potencial promedio autoconsistente sin tomar en cuenta el Principio de exclusión de Pauli. Hartree reemplazó las órbitas individuales de Bohr para cada electrón por funciones de onda de un electrón llamadas orbitales, calculando un valor razonable para la energía de ionización del átomo de He, y un espectro de rayos X para el ión de rubidio,  $\text{Rb}^+$ , en buen acuerdo con los valores experimentales.

En 1929, John Slater (1901–1976) inventó los espínorbitales, que son orbitales que vienen multiplicados por una eigenfunción formal de espín. Los determinantes de Slater son productos antisimetrizados de espínorbitales que, por lo tanto, satisfacen el Principio de Pauli, proporcionando el ingrediente teórico necesario para completar una Teoría No relativista de Estructura de Átomos y Moléculas. El 19 de diciembre de 1929, en una breve nota, Slater explicó cómo deducir los campos autoconsistentes de Hartree con y sin uso del Principio de Pauli. Diez días más tarde en ruso, y dos meses después en alemán, Vladimir Fock (1898–1974) publicó de manera explícita las ecuaciones prometidas por Slater, que hoy se conocen como ecuaciones de Hartree-Fock. Moraleja: hay que concentrarse en terminar las cosas importantes sin interrupciones.

La aproximación de Hartree-Fock se conoce como modelo de electrones independientes o de campo medio. Más allá de Hartree-Fock aparece el problema de la correlación electrónica. Como el tiempo de cómputo aumenta de manera exponencial con el número de electrones, las aproximaciones deben aumentar a un ritmo similar para que el cálculo sea viable.

También en 1929, Dirac publicó su famoso dictum: “las leyes físicas necesarias para la teoría matemática de gran parte de la física y la totalidad de la química son completamente conocidas y la dificultad es que la aplicación exacta de esas leyes lleva a ecuaciones demasiado complicadas para que se puedan resolver.” En los últimos 80 años se han hecho notables avances en la solución aproximada de la ecuación (39.1) para átomos y moléculas. Los hitos principales se mencionan en [1] y referencias.

## MÉTODOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS

Slater fue el adalid de los métodos de primeros principios. Lo siguieron Robert Mulliken (1896–1986), Clemens Roothaan (1918) y los cientos de investigadores e investigadoras que contribuyeron al reconocimiento de la Química Cuántica como una disciplina legítima c.1973.

A nivel Hartree-Fock el problema ha quedado resuelto de manera numérica para átomos en estados fundamentales a nivel norelativista y rela-

tivista, en ambos casos mediante el uso de hamiltonianos convencionales. El problema de los estados excitados no está siquiera bien definido pero se le considera secundario en el cálculo de niveles de energía confiables. Para moléculas diatómicas en geometrías de equilibrio y régimen norelativista el asunto fue solucionado recientemente por un grupo de Toruń, Polonia.

Las soluciones aproximadas de la ecuación de Schrödinger requieren de programas de cómputo de alto grado de complejidad (cientos de miles de líneas de código en lenguajes de alto nivel) y de modernas computadoras electrónicas. Se las puede dividir en tres tipos:

- (I) las que proporcionan resultados aproximados sin cotas de error,
- (II) las ultraespecializadas que resuelven un problema intermedio con gran exactitud, por ejemplo soluciones de Hartree-Fock o de cúmulos acoplados para geometrías moleculares de equilibrio, y
- (III) las que buscan exactitud espectroscópica para átomos y exactitud química para moléculas.

En (I) se centra el grueso de la actividad en Química Cuántica aplicada a nanoestructuras, materiales en general, acción enzimática, desarrollo de celdas solares y, en fin, todo lo que involucre moléculas específicas. Las herramientas computacionales están contenidas en paquetes de programas tanto comerciales como de uso gratuito que en conjunto abarcan todas las metodologías exitosas. Generalmente, se asume que en (II) todo está dicho, aunque la realidad es más compleja, sobre todo cuando los programas provienen de grupos disueltos antes de alcanzar la madurez necesaria.

Finalmente, en (III) se ventilan las grandes preguntas de Física Cuántica y de la metodología de la Química Cuántica: (a) la completez y grado de exactitud de la teoría utilizada, (b) las cotas de error de las propiedades calculadas para cada nivel de teoría, (c) los patrones de convergencia de los métodos utilizados, (d) los límites de exactitud de cada método, y (e) el desarrollo de metodologías directrices, la mayoría de las cuales se han ido agotando, aunque a menudo contribuyen a una infraestructura intelectual y computacional que sirve de soporte a las futuras generaciones.

Existe una enorme gama de programas de cómputo disponibles para cálculos de tipo (I). El más completo de ellos, Gaussian 16 (última versión) es comercial. Sin contar estudiantes, involucró a más de 200 investigadores y postdoctorantes, tiene en su haber cientos de miles de citas y un Premio Nobel otorgado en 1998 a John A. Pople (1925–2004). Para el resto, esto es, para necesidades de tipo (II) y (III), la situación es más complicada.



## A LA CAZA DE LA CORRELACIÓN ELECTRÓNICA

En 2001, ante el anuncio de una inminente aparición de dispositivos de almacenamiento de datos de gran capacidad, rapidez y bajo costo, sentí que me había llegado la hora de apostar mis últimos años para “resolver” el problema de la correlación electrónica en átomos y moléculas. Mi visión inicial fue la del cálculo de la función de onda “ideal” [2], esto es, un desarrollo en serie de eigenfunciones de simetría con bases orbitales optimizadas, y de mínimo costo computacional para un error prefijado  $\Delta E_\mu$  de la energía  $E_\mu$  buscada para el estado estacionario  $\Psi_\mu$ . El cálculo variacional usa un método del tipo “divide y conquista” [3].

Una de las claves es el cálculo *a priori* de errores de truncamiento  $\Delta E_\mu$  mediante fórmulas que fueron postuladas como generalizaciones de fórmulas válidas para elementos de matriz entre determinantes y no entre eigenfunciones de simetría. Los  $\Delta E_\mu$  resultaron ser útiles para seleccionar configuraciones, y también como errores de truncamiento. La parte del programa para las fórmulas, que llenan 80 000 líneas de código, debió generarse mediante un programa especializado para tal fin.

Entre 1982 y el presente, en el Instituto de Física de la UNAM, se han desarrollado los programas de cómputo AUTOCL y ATMOL para cálculo de estados estacionarios y probabilidades de transición eléctricas y magnéticas, dipolares, cuadrupolares y octupolares. La combinación de ambos programas, dinamizados con la metodología descrita arriba, ya permite los mejores cálculos atómicos y moleculares para sistemas de hasta 10 electrones. Cabe destacar el primer cálculo de una superficie de energía potencial que busca exactitud química (para la disociación de la molécula de H<sub>2</sub>O). Volveremos sobre su significado en los Comentarios finales.

AUTOCL facilita la rápida obtención de listas de eigenfunciones de simetría para una enorme variedad de modelos de funciones de onda con un error de truncamiento  $\Delta E_\mu$  que es visualizado según varios criterios. Una vez que se conoce un valor aproximado de  $\Delta E_\mu$ , el programa ATMOL proporciona la energía variacional  $E_\mu$  y un  $\Delta E_\mu$  más exacto.

En este momento buscamos reemplazar la dupla de un hamiltoniano fijo con bases orbitales de efectividad creciente por aproximaciones concurrentes dentro de dicha dupla, a la espera de una mejora sustancial en la convergencia de la venerable expansión de Legendre de 1781 para la recíproca de la distancia  $r_{12}^{-1}$  con consecuencias aún por determinar.

## COMENTARIOS FINALES

Hoy resulta obvio, que las preguntas clave sobre la naturaleza de las sustancias no pudieron encararse por medio de experimentos sino hasta el siglo XVIII, no por falta de laboratorios sino porque faltaba el proyecto de largo aliento enunciado por Boyle. Además, el éxito de un proyecto requiere que se tenga bien claro de dónde se parte y adónde se quiere llegar.

Por ejemplo, como acabamos de mencionar, ya sabemos cómo tratar la disociación del  $\text{H}_2\text{O}$  con exactitud química. ¿Queremos decir que estamos abriendo la puerta para estudios cinéticos de reacciones químicas sencillas? ¡De ninguna manera! Para ello tendríamos que demostrar que podemos hacer lo mismo con moléculas de tres átomos del tipo C, N, u O. Un sistema como el ozono,  $\text{O}_3$ , reúne este requisito, lo cual nos va a exigir tal vez un año adicional para encontrar nuevas aproximaciones confiables y una mejora significativa en el uso y en la eficiencia del programa ATMOL.

Si además queremos estudiar las reacciones de desaparición de ozono en la alta atmósfera, tendríamos que incorporar por lo menos un átomo de cloro, lo cual nos obliga a nuevas aproximaciones. Esto es de suma importancia hacerlo, ya que se desconoce a ciencia cierta cuánto tiempo más persistirán los agujeros de ozono causados por el uso de clorofluorocarbonos, finalmente prohibidos por el Protocolo de Montreal.

La factibilidad de este tipo de trabajo depende del desarrollo de modelos confiables pertinentes en escalas de tiempo de meses, y ello depende de variables externas como la capacidad para diseñar calendarios realistas, acceso previsible a recursos concretos de cómputo, una dedicación y disciplina de trabajo que no admite pérdidas de ritmo, etc.

Los grandes proyectos de la Química Cuántica se encuadran dentro de la modalidad de proyectos demostradamente exitosos y de largo aliento. Las revoluciones científicas que mencionó Kuhn no arrasaron con las grandes teorías sino que las profundizaron. Los triunfalismos de moda sólo sirven para desinformar al público y crear pasiones colectivas que distorsionan los alcances de la propia Ciencia y su financiamiento.

Debería favorecerse el tipo de Ciencia que asegure progreso sostenido a costos que no interfieran con el apoyo a otros sectores de la Ciencia, sobre todo los que son necesarios para garantizar la sustentabilidad del planeta: amortiguación del calentamiento global, producción de energía limpia y barata, control y propiedad pública de suelos para agricultura, minería y esparcimiento, de la biota y de los transgénicos en particular, un ordenamiento educativo y de salud realista para cada país, etc. Es también ne-

cesario evolucionar hacia un ordenamiento económico tipo Bretton-Woods con la consiguiente reformulación del Fondo Monetario Internacional y del Banco Mundial, para desganzar una columna importante del entramado neoliberal. Finalmente, los medios de información deben sujetarse a leyes compatibles con una democracia plena que abra la posibilidad de una vida digna a todos los habitantes del planeta.

En general, los problemas más arduos, como la correlación electrónica, o el ordenamiento económico aludido, bien pudieran no tener una solución definitiva. Pero constituyen un ingrediente esencial de los *grandes* proyectos, que son los verdaderos motores de la Ciencia y del Mundo, donde las hipótesis deberían ser guías flexibles de trabajo, sin dogmas, y en beneficio de los objetivos buscados, y donde todo trabajo fundamental es trabajo en progreso, como nos lo enseñó Boyle hace más de 350 años.

#### GLOSARIO

- **Correlación electrónica:** Lo que es necesario añadir en las ecuaciones y en los métodos de cálculo para aproximar una ecuación de Schrödinger más allá del modelo de electrones independientes.
- **Electrón Volt (eV):**  $1 \text{ eV} = 1.60217733(49) \times 10^{-12} \text{ erg} =$   
 $1 \text{ eV} = 8065.410(24) \text{ cm}^{-1} \cdot hc.$
- **Exactitud espectroscópica:** con error menor o igual a  $1 \text{ cm}^{-1} =$   
 $0.00012 \text{ eV} = 0.003 \text{ kcal/mol} = 4.6 \text{ } \mu\text{Hartree}.$
- **Exactitud química:** con error menor o igual a  $1 \text{ kcal/mol}.$
- **Modelo de electrones independientes:** una aproximación a las soluciones de la ecuación de Schrödinger que promedia las interacciones “instantáneas” entre los electrones. También llamado modelo de campo medio.
- **Mol:** el número de Avogadro,  $N_A$ , también designa una unidad, el mol. Por lo tanto, sus unidades son  $\text{mol}^{-1}$ , de ahí que una energía en electrón voltios (eV), también pueda expresarse en kcal/mol. Los eV designan energías para una molécula, mientras que las kilocalorías (y también kilojoules) se refieren a energías para un mol de moléculas, vis., kcal/mol o kJ/mol. El factor de conversión es  $1 \text{ eV} =$   
 $23.049524(20) \text{ kcal/mol} = 96.485309(82) \text{ kJ/mol}.$

- **Número de Avogadro ( $N_A$ ):**  $N_A = 6.02214086(7) \times 10^{23}$  es el número de átomos de carbono en 12 gramos del isótopo más abundante de dicho elemento.
- **Unidad atómica de energía (Hartree):**  $1 \text{ u} = 1 \text{ Hartree} = 1 E_h = 27.2113961(83) \text{ eV}$ .
- **Unidad atómica de masa:** La unidad atómica de masa es igual a  $1/N_A$  gramos, donde  $N_A$  es el número de Avogadro:  
 $1 \text{ u} = 1.6605402(10) \times 10^{-27} \text{ g}$ . La masa de los núcleos atómicos oscila entre 1 y casi 300 unidades atómicas. La masa en reposo del electrón es igual a  $5.48579903(13) \times 10^{-4} \text{ u}$ .

PARA SABER MÁS:

- Gavroglu, K., y Simões, A., ***Neither Physics nor Chemistry: A History of Quantum Chemistry***, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 2012, 351 pp.

REFERENCIAS

- [1] C. F. Bunge, «Present Status of Selected Configuration Interaction With Truncation Energy Error», en *Advances in Quantum Chemistry*, vol. 76, Elsevier, 2018, págs. 3-34.
- [2] —, «Selected configuration interaction with truncation energy error and application to the Ne atom», *The Journal of Chemical Physics*, vol. 125, n.º 1, pág. 014 107, jul. de 2006.
- [3] C. F. Bunge y R. Carbó-Dorca, «Select-divide-and-conquer method for large-scale configuration interaction», *The Journal of Chemical Physics*, vol. 125, n.º 1, pág. 014 108, jul. de 2006.

## ÁTOMOS Y MOLÉCULAS COMO SISTEMAS AISLADOS: EL PAPEL DE LOS FÍSICOS

Carlos F. Bunge\*

**Dentro de un orden cronológico flexible, examino el papel de los físicos en el progreso de la Teoría Atómica destacando al átomo como caso límite de un sistema aislado. Concluyo con un análisis de la naturaleza de los estados estacionarios atómicos que revela inconsistencias en la Teoría Cuántica de Campos (TCC). La eliminación de las mismas demanda dar cabida a teoremas variacionales pertinentes, ignorados por von Neumann y por Dirac, y una modificación de la visión del mundo de la TCC, que en adelante debe acoger el caso límite de sistemas aislados.**

Este es el segundo de dos capítulos sobre átomos y moléculas como sistemas aislados, donde se destaca el papel de los físicos.

Un átomo es un sistema aislado formado por un núcleo con carga positiva  $Z$  y un número fijo  $N_e$  de electrones con carga negativa que pueden estar, ya sea en su *estado fundamental*, o en un *estado estacionario excitado*. El valor de  $Z$  es un número entero entre 1 y 118. En los átomos neutros  $N_e = Z$ , y en general  $N_e$  puede adquirir valores entre 1 y  $Z + 1$ .

La anterior no es una definición, ya que las cosas *reales* no deben definirse, salvo para el diccionario [1]. Se trata, en cambio, de un resumen de conocimiento científico pertinente a lo que sigue. Siendo una afirmación sobre cosas reales está sujeta a cambios, si bien el autor piensa que estos, a lo sumo, serán modestos. Para evitar rodeos innecesarios, los núcleos radiactivos serán omitidos, aunque los métodos de la Mecánica Cuántica (MC) también permiten investigar sus correspondientes estructuras electrónicas.

Por ahora, las conceptualizaciones más frecuentes de átomos con dos cargas negativas son átomos de oxígeno dentro de óxidos metálicos como

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

BeO, pero el ion  $O^{2-}$  libre no existe siquiera en forma de estados metaestables, por lo tanto se trata de una entidad imaginaria sin propiedades, que se usa como conceptualización, no para designar una cosa real. Mediante cálculos de primeros principios se ha probado que unos pocos elementos, como el Ne y el Mn, no forman iones negativos de larga duración: nunca podrán hacerse haces atómicos con los iones negativos de estos elementos.

Si bien tanto el He como el N no forman iones negativos estables, se los ha preparado en condiciones controladas de laboratorio en estados metaestables que se autoionizan en intervalos de tiempo entre mili y nanosegundos, respectivamente. Si existieran iones negativos  $N^-$  de larga vida, estos actuarían como contaminantes en el fechado de muestras orgánicas por medio de la técnica del carbono 14.

Los núcleos están formados por protones y neutrones, los que a su vez se les considera formados por quarks, aunque esto último permanece irrelevante para la física atómica: no por culpa de ella, sino por las dificultades que ha encontrado la Cromodinámica Cuántica para producir distribuciones de la carga eléctrica de los quarks dentro de los núcleos, en especial en el protón y el deuterón. Resultados recientes indican que la distribución de carga en el espacio de momentos posee un cero y que ello no quedaría resuelto antes de la próxima década.

En efecto, la frecuencia  $\nu$  de la transición hiperfina de 21 cm entre los niveles  $1s$  del átomo de hidrógeno, que hizo posible la Radioastronomía, ha sido medida con gran exactitud desde 1971:  $\nu = 1420.4057517667$  MHz. Este valor difiere en la tercera decimal del calculado usando teoría relativista y Electrodinámica Cuántica. El desacuerdo se atribuye a los modelos utilizados para la distribución de carga dentro del protón.

Una molécula se distingue de un átomo en dos aspectos principales: un número fijo de núcleos mayor a 1, y un número también fijo de electrones limitado entre  $Z - p$  y  $Z + q$ .  $Z$  es la suma de las cargas de todos los núcleos, y ni  $p$  ni  $q$  pueden tomar valores mucho más allá de 2 para moléculas pequeñas, ya que de lo contrario el sistema no duraría más de  $10^{-12}$  segundos antes de descomponerse en fragmentos, y por lo tanto antes de adquirir propiedades moleculares bien definidas.

Tanto en el caso atómico como en el molecular, los estados excitados necesariamente decaen radiativamente, emitiendo uno y hasta dos fotones, a veces expulsando electrones simultáneamente. Las moléculas también pueden descomponerse espontáneamente en fragmentos moleculares.

Además de estructura electrónica, las moléculas poseen estructuras vibro-rotacionales o similares, que en solución participan en transiciones *no ra-*

*diativas* entre estados estacionarios. La importancia de las transiciones no radiativas fué percibida en 1946 por el químico Michael Kasha (1920–2013) en conexión con la explicación de la fosforescencia.

A temperatura ambiente, la mayoría de los átomos y moléculas están en su estado electrónico fundamental. Como las moléculas estables generalmente tienen un número par de electrones, la mayoría de ellas están en estados singletes, esto es, de espín electrónico igual a cero. Al absorber un fotón, las moléculas pasan a un estado electrónico singlete excitado en un estado vibracional también excitado. En estado gaseoso, los estados electrónicos excitados singlete evolucionan rápidamente a otro estado singlete emitiendo un fotón en cualquier dirección. En cambio, en solución, los estados singlete también pueden decaer, a menudo de manera preferente, a niveles triplete por medio de transiciones no radiativas.

Gracias a efectos relativistas, los estados triplete finalmente pasan a estados singlete de energía más baja en tiempos que pueden ser muy largos, dependiendo de la magnitud del efecto relativista, emitiendo los fotones que constituyen la fosforescencia. Este simple mecanismo tuvo la oposición de científicos eminentes, como Hans Bethe y Edward Teller, hasta que al cabo de 10 años cambiaron de opinión y Kasha se hizo famoso al instante.

Las transiciones no radiativas son fundamentales con relación a la naturaleza misma de los estados estacionarios moleculares, tanto en física como en química, como en materiales, bioquímica y biología. En particular, explican la rápida transferencia de energía entre modos vibracionales localizados en diferentes regiones de una molécula, como una proteína a punto de catalizar una reacción química.

En realidad, los átomos y las moléculas en el Universo, y en particular dentro de los seres vivos, están interaccionando sin parar en todo momento. Las condiciones externas imperantes determinan los tipos de interacción que se presentan, afectando el comportamiento de átomos y moléculas en mayor o menor grado, pero no sus propiedades, ya que estas solamente se encuentran asociadas al caso límite de un sistema aislado.

El mundo atómico-molecular, en particular lo que percibimos cuando estamos despiertos, puede visualizarse como un armado de lego con piezas levemente deformables y contactos altamente cambiantes, que evolucionan por una variedad de caminos. Si el sistema es cerrado, la MC establece que la probabilidad de seguir tal o cual camino es perfectamente determinista. A veces esta puede medirse, y a veces se la puede calcular, aunque a menudo esto último resulta imposible debido a dificultades para identificar los estados estacionarios involucrados. Además, todos los sistemas reales son

abiertos, de ahí la enorme variedad de la Naturaleza.

En el capítulo anterior nos ocupamos del papel de los químicos en develar la existencia de átomos y moléculas, preparando el terreno para la entrada en escena de los físicos. Los químicos, a su vez, partieron de las especulaciones de Demócrito y las elaboraciones de Epicuro y su escuela, todas ellas integradas en una visión coherente y convincente del mundo, recogida en *De Rerum Natura*, el poema inmortal de Lucrecio. Esta obra fue el punto de partida de la transición de la Alquimia a la Química, y de la revolución intelectual que dió origen a la Ilustración del siglo XVIII.

#### LOS FÍSICOS AVERIGUAN DE QUÉ ESTÁN HECHOS LOS ÁTOMOS

La primera aplicación de la teoría atómica de Demócrito-Epicuro la hizo el científico Daniel Bernoulli (1700–1782), inventor de la teoría cinética de los gases (1738) y otras cosas aún más importantes. Bernoulli partió de la conceptualización de un gas formado por átomos moviéndose muy rápidamente, tal cual lo describe Lucrecio. Haciendo uso de la mecánica newtoniana y suponiendo choques elásticos, dedujo la ley de Boyle (1662) que relacionaba la presión y el volumen de un gas, pero fué ignorado.

El siglo XIX es testigo de una primera síntesis de la física clásica. Las leyes de la electrólisis (1832) de Michael Faraday (1791–1867) y sus experimentos posteriores (1845) indicaron que existía un solo tipo de corriente eléctrica, y que ésta consistía en el transporte de cargas eléctricas con la misma magnitud. La partícula transportadora fue llamada electrón en 1891, antes que J. J. Thompson (1856–1940) la descubriera en 1897.

El descubrimiento del electrón fué consecuencia ineludible de los estudios iniciados en 1838 por Faraday sobre descargas en gases contenidos en tubos en los que se hacía un vacío aceptable. Sus tubos fueron mejorados a partir de 1875 por William Crookes (1832–1919). Crookes regaló más de un centenar de estos tubos, tanto en Inglaterra como en el Continente Europeo y EE.UU., en una época en que el correo era excelente. La amplia difusión de tubos de Crookes permitió su rápido perfeccionamiento, del que se beneficiaron tres galardonados con el Premio Nobel de Física.

Durante la última década del siglo XIX, Philipp Lenard (1862–1947) desarrolló un protocolo para construir laminillas de metal muy delgadas que le sirvieron para mejorar el tubo de Crookes en sus estudios del efecto fotoeléctrico, y para el experimento con que Thompson descubrió el electrón. En 1908, Geiger y Marsden, diseñaron un experimento para estudiar la deflexión que una de esas laminillas, hecha de oro, producía en un haz de



núcleos de He que se movían con una velocidad cercana a la velocidad de la luz, esto es, con mucha energía. El jefe del laboratorio, Ernest Rutherford (1871–1937), pidió a sus colaboradores que buscaran si había núcleos que salieran rebotados hacia atrás. Para sorpresa de algunos, bastantes núcleos de He rebotaban como si la laminilla de oro estuviera compuesta de núcleos de carga positiva que contenían casi toda la masa atómica. Era como si una bala de cañón rebotara en un blanco hecho de papel.

Rutherford se avocó a deducir la distribución angular de los núcleos de He y en 1911 obtuvo la fórmula que daba cuenta de los resultados experimentales. Nació así el modelo del átomo de Rutherford, que esencialmente es el que se usa actualmente en la física atómica: los átomos están hechos de un núcleo con carga positiva donde está concentrada casi toda su masa, y de electrones con carga negativa que se mueven a su alrededor.

El átomo de Rutherford fue ignorado, hasta que Henry Moseley (1887–1915) demostró (1913) que el número atómico de Mendeléyev era precisamente la carga  $Z$  del núcleo atómico, enriqueciendo así tanto el modelo de Rutherford como la noción de elemento químico de Boyle. Su resultado ya había sido previsto por el físico aficionado Antonius van den Broek (1870–1926) a un mes de la aparición del artículo de Rutherford.

En 1912 Niels Bohr (1885–1962) visitó a Rutherford en Manchester, Inglaterra. Después de atender el golpeo de la puerta de su oficina, y tras los protocolos habituales, Rutherford se fue enterando que Bohr era uno de esos nuevos especímenes de físicos: Bohr no sabía de laboratorios y Rutherford no atinaba a entender cuál pudiera ser el propósito de tener un “físico teórico” a su lado. La sorpresa de Rutherford fue tal, que solamente atinó a tomar un gis, subirse al estrado del pizarrón, y poner a su visitante al corriente con la nueva concepción de la estructura del átomo.

A todo esto, experimentos en electricidad y magnetismo habían llevado a la síntesis de James Clerk Maxwell (1831–1879) en la Teoría del Electromagnetismo (1865), en la que destacamos la predicción de la luz como fenómeno electromagnético. La producción de ondas electromagnéticas (1888) se debe a Heinrich Hertz (1857–1894), quien preguntado sobre su utilidad respondió que no servirían para nada. Hertz ya había descubierto el efecto fotoeléctrico en 1887, que fue interpretado por Albert Einstein (1879–1955) en 1905 con la hipótesis de que la luz está compuesta por cuantones de energías bien definidas y proporcionales a su frecuencia: así nace la Física Cuántica, aunque habría que esperar otros 8 años antes que alguien lo tomara en serio.

Bohr volvió a presentarse al cabo de unas pocas semanas con su teoría

del átomo de hidrógeno, con la cual predecía la posición de la línea Lyman alfa a  $1216 \text{ \AA}$  con una exactitud comparable al error experimental de la época. Rutherford habría quedado boquiabierto. Bohr basaba su teoría en un electrón que recorría una órbita circular alrededor de un núcleo con carga  $Z = 1$ . Las órbitas permitidas exigían que la integral circular del producto interno del momento angular orbital  $\vec{L}$  con el elemento de camino  $d\vec{s}$  fuera igual a  $nh$ , donde  $n$  asume valores enteros  $1, 2, \dots$  y  $h$  es la constante de Planck usada por Einstein (1905) en su interpretación del efecto fotoeléctrico. La constante  $h$  había sido introducida por Max Planck (1858–1947) en 1900, en la primera Teoría Cuántica, donde estableció la distribución de frecuencias de los fotones emitidos por un cuerpo negro.

La teoría de Bohr introdujo suposiciones fundamentales que más tarde serían incorporadas a la Física Cuántica y a la Mecánica Cuántica.

1. El electrón en el átomo de hidrógeno puede ubicarse en una infinidad de órbitas circulares, que hoy conocemos como estados estacionarios, y que dan origen a un espectro de energías discretas.
2. Un electrón puede saltar espontáneamente de una órbita  $q$  con energía  $E_q$  a otra órbita  $p$  de menor energía  $E_p$ , en cuyo caso, de manera simultánea, emite un cuantón electromagnético de energía  $E_q - E_p = h\nu$  (llamado fotón por G. N. Lewis en 1926), explicando la emisión de radiación al pasar de un estado estacionario a otro de menor energía.
3. Un electrón en una órbita con energía  $E_p$  puede absorber un fotón de energía  $E_q - E_p = h\nu$  para pasar a otra órbita  $q$  de mayor energía  $E_q$ . La absorción de un fotón es el proceso inverso a la emisión, explicando por qué los espectros de absorción y de emisión comparten algunas líneas excepto por pequeñas desviaciones asociadas a la conservación de energía y de momentos lineales de los cuantones involucrados.

Con ello Bohr dió un espaldarazo a la interpretación del efecto fotoeléctrico hecha por Einstein, que había sido duramente ignorada por Planck. Einstein, y Bohr 8 años más tarde, fueron los primeros en dar a  $E = h\nu$  su verdadero significado físico, confirmado en 1916 por Robert Millikan (1868–1953) con la primera determinación “exacta” de  $h$ .

Planck concebía las energías  $nh\nu$  de sus osciladores como un truco matemático, enfatizando que estaban desprovistas de significado físico. Aún en junio de 1913, en su carta de recomendación para el ingreso de Einstein a la Academia Prusiana de Ciencias, Planck escribe: (trad. del alemán) “*That*

*he might have in his speculations, occasionally, overshoot the target, as for example in his light quantum hypothesis, should not be counted against him too much; because without taking a risk, even in the most exact science, one is not driven to real innovation."*

#### DEL ÁTOMO DE HIDRÓGENO A LA MECÁNICA CUÁNTICA

El modelo de Bohr predijo las series espectrales de Balmer (visible) y de Lyman (ultravioleta) pero fracasó con el átomo de helio. Su subsiguiente explicación de los espectros de los metales alcalinos Li, Na, K, Rb y Cs, le dieron nuevos ánimos. En "La Constitución de los Átomos y las Propiedades Físicas y Químicas de los Elementos" (en alemán) de 1922, que le valió el premio Nobel de Física de ese mismo año, Bohr dió una explicación de la Tabla Periódica de Mendeléyev, de la valencia química, y de la reactividad química, como consecuencia directa de la estructura electrónica de los átomos, otro concepto inventado por Bohr.

Al haber supuesto la necesidad de llenar cada órbita con dos electrones, Bohr plantó la semilla para el Principio de Exclusión de Pauli de 1925. Éste último justificó su principio suponiendo una nueva propiedad del electrón: la "valoridad dual" o "dos valores", sin contrapartida clásica. Los holandeses Uhlenbeck y Goudsmit inmediatamente reconocieron los dos valores de Pauli como un número cuántico asociado al momento angular de espín. Al día siguiente de su publicación en el *Naturwissenschaften*, el equipo holandés recibió una carta de Heisenberg, felicitándolos por su artículo corajudo, y terminando con un inquietante ¿Qué hicieron con el factor de 2? Meses más tarde, Thomas proporcionó la justificación del factor de 2. Moraleja: la ignorancia a veces ayuda a proponer una hipótesis exitosa, aunque es mejor tener la inteligencia de Heisenberg y saber que a las teorías no hay que matarlas antes de su nacimiento.

#### LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

Pasaremos por alto la indispensable hipótesis de Louis de Broglie (1892–1987) y los experimentos de Arthur Compton (1892–1962) que comprobaron la naturaleza corpuscular de los fotones. Werner Heisenberg (1901–1976) presentó su MC matricial a finales del verano de 1925. En enero de 1926, Erwin Schrödinger (1887–1961) publicó el primero de sus cuatro artículos sobre su ecuación que sentaría las bases de la MC como la conocemos hoy día. Para calcular propiedades atómicas y moleculares, hay que separar la

coordenada tiempo del resto, para llegar a la ecuación de Schrödinger para estados estacionarios, la madre de todas las ecuaciones de estructura atómica y molecular:

$$H_{nr}\Psi_i = E_i\Psi_i, \quad (40.1)$$

donde  $H_{nr}$  es un operador hamiltoniano norelativista, que contiene una descripción muy general del átomo o de la molécula. En la ecuación (40.1), si  $\Psi_i$  es univaluada, de cuadrado integrable y antisimétrica con respecto a cualquier permutación entre coordenadas electrónicas,  $E_i$  es la energía del sistema en el estado estacionario  $\Psi_i$ . Para estas fechas, el estatus de los estados estacionarios había crecido del concepto primitivo de Bohr a propiedad atómica, luego de los experimentos de Franck y Hertz (1914).

El conjunto de energías  $\{E_i, i=1, 2, \dots\}$  se llama espectro discreto del sistema representado por  $H_{nr}$ , que tiene infinitos elementos en el caso de átomos neutros, pero que es un conjunto vacío en la mayoría de los sistemas concebibles, tanto atómicos como moleculares. De ahí el interés por conocer la existencia de un espectro discreto en el caso de iones negativos atómicos y en agregados atómicos que pudieran formar moléculas estables. Además,  $H_{nr}$  posee un espectro continuo a partir del primer umbral de disociación de cualquier átomo, pero no nos ocuparemos de él.

En 1926, Max Born (1882–1970) propuso que  $|\Psi_i|^2$  integrada sobre un volumen  $V$  es la probabilidad de que un electrón sea encontrado en  $V$  por un observador. Una interpretación realista cambia “sea encontrado en  $V$  por un observador” por “esté en  $V$ ”, independientemente de cualquier observador, ya que se trata de una propiedad relevante al funcionamiento del mundo. De lo contrario, la Historia Natural de la Tierra hubiera estado supeditada a la existencia de los mentados observadores, etc. Más aún, se antoja imposible diseñar un experimento con átomos que permita a un observador llevar a cabo una hazaña como la propuesta por Born. Ajenos a toda referencia a la MC, los observadores son anacronismos de una filosofía positivista superada [2].

Dos años más tarde, Paul Dirac (1902–1984) publicó su famosa ecuación relativista para un electrón en un campo central con un núcleo de masa infinita. Para átomos de muchos electrones, la ecuación de Dirac resulta:

$$H_r\Phi_i = \epsilon_i \Phi_i, \quad (40.2)$$

donde el hamiltoniano relativista  $H_r$  es una matriz de dimensión  $4 \times 4$ , por lo que  $\Phi_i$  es un vector de dimensión 4 cuyos elementos son a su vez funciones. Además,  $H_r$  es un operador hermitiano no acotado (OHNA) que tiene

un espectro discreto intercalado entre dos espectros continuos: el usual por encima del primer umbral de ionización, y uno que empieza por debajo del estado fundamental en el caso de átomos multi-electrónicos, o por debajo de  $-mc^2$  en el caso del átomo de hidrógeno, donde  $m$  es la masa en reposo del electrón y  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío.

La presencia del espectro continuo inferior contradice la fórmula de Einstein  $E = mc^2$ . El problema se ha enfocado de dos maneras: (i) la tradicional, que introduce una interpretación de las soluciones de la ecuación (40.2) incorporando una nueva partícula, el positrón, aunque este no aparece en  $H_r$ . Sin resolver la contradicción con la fórmula de Einstein, la interpretación se vindica *a posteriori* por dar origen a la Teoría Cuántica de Campos (TCC) que permite predecir con mucha exactitud el corrimiento Lamb y el factor giromagnético del espín electrónico, y (ii) una teoría libre de contradicciones matemáticas y físicas, basada en que los estados estacionarios corresponden a mínimos de la energía, y que explica la exactitud de la TCC para sistemas con un solo electrón, pero que demanda cambios conceptuales en TCC para átomos multi-electrónicos.

Las ecuaciones (40.1) y (40.2) esconden un principio variacional que es neutro respecto de si los puntos estacionarios son mínimos, máximos o puntos de inflexión. Los mínimos estacionarios  $E_{min}$  satisfacen:

$$\frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} \frac{\langle \Psi_i(\zeta) | H | \Psi_i(\zeta) \rangle}{\langle \Psi_i(\zeta) | \Psi_i(\zeta) \rangle} \Big|_{\zeta=Z} > 0, \quad (40.3)$$

donde la carga nuclear  $Z$  dentro de  $\Psi_i$  se reemplaza por una variable  $\zeta$  y la segunda derivada parcial se toma en  $\zeta = Z$ . Cualquier otro parámetro en  $\Phi_i$  es igualmente adecuado. Los estados  $E_{min}$  corresponden a los  $\Psi_i$  de la ecuación (40.1) y los  $\Phi_i$  de la ecuación (40.2). El espacio abstracto de Hilbert es demasiado abstracto para adecuarse a la ecuación (40.3), por lo que las bases matemáticas de la MC expuestas por John von Neumann (1903–1957) deberían haberse formulado en el espacio de Hilbert tradicional que contiene funciones en el espacio configuracional del sistema. Para átomos de un electrón, o cuando el  $H_r$  multi-electrónico se aproxima mediante una matriz finita  $\mathbf{H}_r$  [3], los “estados” de “energías negativas” corresponden a máximos estacionarios  $E_{max}$ , para lo cual  $> 0$  se reemplaza por  $< 0$  en la ecuación (40.3).

El teorema variacional para el estado fundamental de la ecuación (40.1) se conoce como teorema de Rayleigh-Ritz, enunciado por Walther Ritz (1878–1909) en 1908. Para *todos* los estados estacionarios existe el teorema del matemático y computólogo canadiense J. K. L. MacDonald (1905–1949) [4]. Sea

A un operador hermitiano acotado por debajo, con eigenvalores  $\{a_i, i=1, 2, \dots\}$  ordenados de manera no decreciente, y sea  $\mathbf{A}^{(p)}$  su representación matricial en una base ordenada de tamaño  $p$  variable y eigenvalores  $a_i^{(p)}$ . Estos satisfacen las desigualdades siguientes [4]:

$$a_i \leq a_i^{(p+1)} \leq a_i^{(p)} \leq a_{i+1}^{(p+1)}, \quad (40.4)$$

esto es, los eigenvalores de órdenes sucesivos  $i, i + 1$  de la matriz de dimensión  $p + 1$  siempre *entrelazan* al eigenvalor de orden  $i$  de la matriz de dimensión  $p$ . Como  $H_{nr}$  es acotado por debajo, de las ecuaciones (40.3) y (40.4) sigue que todos los  $E_i$  de la ecuación (40.1) son mínimos estacionarios  $E_{min}$ .

Un corolario de la ecuación (40.3) es:

$$a_i \leq a_i^{(p)} \leq a_{i+1}^{(p+1)} \leq a_{i+2}^{(p+2)} \dots \leq a_{i+Q}^{(p+Q)}. \quad (40.5)$$

La ecuación (40.5) conecta los eigenvalores de un conjunto de matrices hermitianas anidadas, cada una dentro de la siguiente, y será clave para identificar las aproximaciones a los eigenvalores discretos  $\epsilon_i$  de  $H_r$  en la ecuación (40.2) [3].

La aplicación transparente de las ecuaciones (40.1) y (40.2) requiere el uso de eigenfunciones de simetría, esto es, eigenfunciones de todos los operadores que conmutan con  $H_{nr}$  o  $H_r$ . Para átomos y  $H_r$  estas son eigenfunciones (de  $N_e$  electrones) de  $J^2, J_z$  y paridad, que definen un espacio con acoplamiento  $jjJM$  que lleva la paridad de manera implícita.

#### LA TCC PRODUCE UN ESPECTRO AMBIGUO

Introducimos un espacio finito de orbitales (bispinores de Dirac)  $U(m) \equiv U^+(m) \cup U^-(m) \equiv \{u_n^+, u_n^-; n = 1, 2, \dots, m\}$  con las componentes superiores e inferiores definidas para evitar el colapso variacional:

$$h_0(1)u_n^+ = \epsilon_n^+ u_n^+, \quad \epsilon_n^+ > 0, \quad (40.6)$$

$$h_0(1)u_n^- = \epsilon_n^- u_n^-, \quad \epsilon_n^- < 0, \quad (40.7)$$

donde  $h_0(1)$  es un hamiltoniano tipo-Dirac que se puede escoger de múltiples maneras, por ejemplo, con base en orbitales naturales de matrices densidad reducidas, o partiendo de hamiltonianos efectivos como Hartree-Fock.

El camino seguido por la Teoría de Estructura Atómica basado en “estados” de un electrón y TCC, parte del hamiltoniano de “no-pares”  $\mathbf{H}_r^+$ , una matriz hermitiana de dimensión  $D^+$ .  $\mathbf{H}_r^+$  está definida en un espacio de productos de “estados” de energías positivas de  $U^+(m)$  luego de eliminar los “estados” de energías negativas en  $U^-(m)$ . Cuando sea pertinente, reemplazaremos “estados” (una palabra que generalmente se usa para contrabandear contenido físico cuando no lo hay) por la palabra orbitales, un objeto matemático que a veces puede interpretarse físicamente.

La ecuación matricial de eigenvalores viene dada por:

$$\mathbf{H}_r^+ \mathbf{C}_i^+ = E_i^+ \mathbf{C}_i^+, \quad i = 1, 2, \dots, D^+, \quad (40.8)$$

que tiene la importante propiedad de producir el mismo número de eigenvectores que en el caso no relativista expresado en acoplamiento  $jjJM$ . El ingrediente que proporciona significado físico a la ecuación (40.8) es la elección de  $U^+(m)$  como el espacio de orbitales de Hartree-Fock de energías positivas. Pero esta es solo una entre un número **ilimitado** de posibilidades, por ejemplo, el espacio de orbitales naturales de energías positivas. En consecuencia, el espectro  $\{E_i^+; i=1, 2, \dots, D^+\}$  en la ecuación (40.8) depende de la selección de  $U^+(m)$  en la ecuación (40.6). Por ejemplo, las energías obtenidas para el estado fundamental del ión  $U^{90+}$  difieren en 0.068 eV dependiendo si se usan orbitales naturales u orbitales de Hartree-Fock [3], ilustrando una ambigüedad **inevitable**. Como advirtió Dirac [5], las ambigüedades constituyen una dificultad de Clase-Dos incompatibles con Ciencia seria, por lo que revelan la **necesidad** de un desarrollo adicional de la teoría.

#### LA TEORÍA QUE PRODUCE UN ESPECTRO BIEN DEFINIDO

Como el operador  $H_r$  es un OHNA, el teorema variacional de la ecuación (40.4) no es aplicable. Usando la base completa  $U(m)$  de las ecuaciones (40.6) y (40.7), la ecuación matricial de eigenvalores de dimensión  $D$  viene dada por:

$$\mathbf{H}_r \mathbf{C}_i = E_i \mathbf{C}_i, \quad i = 1, 2, \dots, D, \quad (40.9)$$

cuyos eigenvalores  $E_i$  son invariantes respecto de transformaciones no singulares en la base de orbitales  $U(m)$ , incluyendo aquellas que mezclan orbitales de energías positivas y negativas. Definiendo  $D^- = D - D^+$ , reemplazando en la ecuación (40.5)  $p = D^+$ ,  $Q = D^-$ , se obtiene [3]:

$$E_i^+ \leq E_{i+D^-} \quad i = 1, 2, \dots, D^+. \quad (40.10)$$

La ecuación (40.10) indica que los invariantes  $E_{i+D^-}$ ,  $\{i=1, 2, \dots, D^+\}$  son cotas superiores a los eigenvalores mal-definidos  $E_i^+$  de la teoría dictada por la TCC [3], para cualquier selección de orbitales de energías positivas.

En la ecuación (40.10), la desigualdad se convierte en igualdad solamente cuando el hamiltoniano de “no-pares”  $H_r^+$  se desacopla de manera exacta del hamiltoniano completo  $H_r$  lo cual, a su vez, exige que los elementos de matriz en la ecuación (40.9) entre los términos en  $U^+(m)$  y el resto sean iguales a cero. Esto solamente es posible cuando el potencial entre los electrones en  $H_r$  es un potencial de campo medio. En consecuencia, los operadores de creación y de aniquilación en el formalismo de segunda cuantización no pueden definirse en presencia de electrones interactuantes. La segunda cuantización permanece útil dentro de las limitaciones que acabamos de exponer. En cambio, para sistemas de un solo electrón, los orbitales de energías positivas y negativas se desacoplan de manera exacta, permitiendo excelentes predicciones del corrimiento Lamb y del factor giromagnético del espín del electrón.

La naturaleza de los estados estacionarios demanda:

- (I) Un regreso al espacio de Hilbert original en reemplazo del espacio abstracto de Hilbert, y la inclusión del teorema variacional de [4] y de la ecuación (40.10) en los fundamentos matemáticos de la MC.
- (II) Una modificación de la visión del mundo de la TCC, que acoja la incorporación del caso límite de estados aislados y por lo tanto la inclusión de orbitales de energías negativas, balanceando la belleza estética de la TCC [5] con la belleza objetiva de las verdades de la Ciencia.
- (III) Que la noción de campo de un electrón o de cualquier otra partícula descrita por un  $H_r$  tipo-Dirac no es válida en presencia de dos o más partículas idénticas, como acabamos de demostrar.

#### COMENTARIOS FINALES

Las teorías físicas serias predicen resultados experimentales. Algún tipo de teoría siempre antecede a experimentos importantes. No es a la inversa, como a menudo se repite sin fundamento, que el experimento sugiere la teoría: algunos experimentos apuntan a la necesidad de una teoría que aún falta por hacer. Análogamente, en Ciencias Fáticas, a diferencia de Ciencias Formales, una teoría matemática sin una clara conexión con la realidad que



se pretende describir, es como una espada sin cabeza, al margen de lo que su belleza estética pudiera sugerir.

El triunfalismo avasallador que permea una buena parte de la física teórica contemporánea, induce pasiones colectivas que silencian el juicio imparcial desorientando a generaciones enteras, e interfiere peligrosamente con el rumbo de la propia especialidad: la búsqueda responsable y desinteresada de la verdad es absolutamente necesaria y constituye la única guía legítima en el interminable camino del conocimiento científico.

La ciencia del átomo lleva casi 2 400 años y, lejos de ser una teoría final, continúa avanzando gracias al esfuerzo de pensadores e investigadores inventivos y corajudos. Los desafíos actuales abarcan desde el desarrollo de la teoría del átomo, aproximada e incompleta a la fecha, hasta la producción de gases en nuevos entornos artificiales. Ello exige la identificación y caracterización teórico-experimental de especies atómicas en una gran variedad de situaciones, en particular en los plasmas de los reactores de fusión controlada, que podrían usarse para producir electricidad.

## GLOSARIO

- **Cosa real:** Cosa formada por materia, por ejemplo, un electrón o un elefante, que existe al margen de los seres humanos.
- **Electrón Volt (eV):**  $1 \text{ eV} = 1.60217733(49) \times 10^{-12} \text{ erg}$   
 $1 \text{ eV} = 8065.410(24) \text{ cm}^{-1} \cdot hc.$
- **Estado estacionario:** Estados con una energía menor a la del primer umbral de ionización atómica o molecular, o a la del primer umbral de disociación molecular. No todo  $H_{nr}$  o  $H_r$  los posee.
- **Estado estacionario excitado:** Estado estacionario que no es el estado fundamental.
- **Estado fundamental:** Estado de mínima energía de un átomo o de una molécula.
- **Materia:** cualquier objeto con masa, los fotones aunque carezcan de masa, y cualquier gravitón que pudiera existir.
- **Materialismo emergentista:** la versión del emergentismo que sostiene que todos los existentes reales son materiales [1].

- **Materialismo epicúreo:** el materialismo reduccionista, desarrollado a partir de Epicuro, que difiere del anterior por carecer de emergentismo.
- **Propiedades atómicas y moleculares:** propiedades de algún estado estacionario atómico o molecular  $\Psi_\mu$ , tales como la densidad electrónica, o el momento dipolar de una molécula.
- **Teoría de Estructura Atómica:** una teoría que da cuenta de las propiedades de cualquier átomo en cualquier estado estacionario.
- **Teoría reduccionista:** una teoría de primeros principios, como la Mecánica Cuántica, que busca predecir todas las propiedades de sus referentes principales sin recurrir a parámetros empíricos diferentes de las llamadas constantes universales. Como cualquier teoría física, las teorías reduccionistas tienen un dominio finito de validez.
- **Valores de expectación:** reliquia de la época en que las probabilidades se equiparaban con ignorancia, ver valores promedio.
- **Valores promedio:** es el valor promedio de una propiedad  $P$  de un sistema en un estado con eigenfunción normalizada  $\Psi_i$ , dado por  $\int \Psi_i^* \hat{P} \Psi_i dx$  donde  $\hat{P}$  es el operador asociado a la propiedad  $P$ ,  $dx$  es el producto de los diferenciales de todas las coordenadas pertinentes, y la integral es sobre el hiperespacio ocupado por cada una de las coordenadas del sistema.

#### ACRÓNIMOS

- **MC:** Mecánica Cuántica.
- **OHNA:** Operadores hermitianos no acotados.
- **TCC:** Teoría Cuántica de Campos.

#### PARA SABER MÁS:

- Wichman, E.H., *Física Cuántica*, Editorial Reverté, Barcelona, 1986, 477 pp.
- Kleppner, D., *A Short History of Atomic Physics in the Twentieth Century*, Reviews of Modern Physics Vol. 71, No. 2, Centenary 1999, S78–S84.

REFERENCIAS

- [1] M. Bunge, *Diccionario de filosofía*. México: Siglo XXI, 2001.
- [2] ———, *Foundations of Physics*, ép. Springer Tracts in Natural Philosophy. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1967.
- [3] R. Jáuregui, C. F. Bunge y E. Ley-Koo, «Upper bounds to the eigenvalues of the no-pair Hamiltonian», *Physical Review A*, vol. 55, n.º 3, págs. 1781-1784, mar. de 1997.
- [4] J. K. L. MacDonald, «Successive Approximations by the Rayleigh-Ritz Variation Method», *Physical Review*, vol. 43, n.º 10, págs. 830-833, mayo de 1933.
- [5] P. A. M. Dirac, «The Evolution of the Physicist's Picture of Nature», *Scientific American*, vol. 208, págs. 45-53, mayo de 1963.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

## ENTRE LO MACRO Y LO ATÓMICO ESTÁ LO NANO

*Ignacio L. Garzón\**

Mientras la física clásica trata con descripciones macroscópicas, sin preocuparse por la estructura fundamental de la materia, lo que ocurre a nivel de átomos y moléculas individuales es sujeto de estudio de la física cuántica. ¿Pero cuál es la descripción más apropiada para aquellos sistemas constituidos por un número finito de átomos? En la actualidad no se cuenta con una respuesta contundente para esta pregunta. Sin embargo, para empezar a entender por qué los materiales de tamaño nanométrico tienen propiedades novedosas, se pueden considerar las siguientes causas. Por un lado, existe una gran proporción de átomos que se encuentran en la superficie de un nanomaterial, con respecto a aquellos que se encuentran en su interior. Adicionalmente, los electrones en un sistema nanométrico están sujetos a un confinamiento cuántico y, por otro lado, los nanomateriales se encuentran lejos del límite termodinámico, dado el número finito de átomos que los constituyen. Así, una nanopartícula formada por algunas decenas de átomos puede cambiar dramáticamente sus propiedades por el sólo hecho de contener un átomo más, o incluso, con el mismo número de átomos, si éstos se acomodan de manera diferente. Esto hace de la “nanociencia” un tema por sí mismo que será analizado en las siguientes secciones.

Entre los objetivos más importantes de los físicos están descubrir, entender y predecir las propiedades y fenómenos que experimentan la materia y la energía en el espacio y en el tiempo. Para estos estudios es conveniente enfocarse en escalas específicas tanto a nivel espacial y temporal, como de tamaño y cantidad de materia del sistema. Por ejemplo, la física nuclear estudia las propiedades que despliegan los núcleos atómicos en escalas espaciales del orden de  $10^{-15}$  m, mientras que la geofísica, es decir, la física

---

\*Departamento de Sistemas Complejos, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

del planeta Tierra se dedica a investigar fenómenos que suceden en ella en escalas de  $1-10^6$  m. De la misma manera, la física atómica se enfoca al estudio de las propiedades de los átomos cuyo tamaño se ubica en el rango de  $10^{-10}$  m, y la física de sólidos se interesa en los fenómenos que suceden en materiales de tamaño macroscópico que pueden variar en el rango de  $10^{-3}-10$  m.

Por otro lado, desde hace alrededor de 50 años existe un interés creciente por estudiar el comportamiento de la materia en una escala espacial que no había sido considerada anteriormente. Esta escala corresponde a la llamada *nanoescala*, donde la materia con dimensiones entre 1–100 nm ( $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ ) muestra propiedades y fenómenos novedosos, con respecto a los que despliega en la escala macroscópica. Resulta muy significativo que el estudio de las nuevas propiedades y fenómenos que experimenta la materia a escala nanométrica no recibe el nombre de nanofísica, sino que en su lugar se utiliza la palabra *nanociencia*. Esto se debe a que dicho estudio es extraordinariamente importante, no sólo de interés para la física, sino también para la química, la biología, la medicina, la ciencia e ingeniería de materiales, y también para otras áreas relacionadas con la tecnología, como la electrónica, la robótica, la agricultura y la conservación de alimentos.

En efecto, el hecho de que la materia adquiriera nuevas propiedades y experimente fenómenos novedosos en la escala nanométrica ha generado muchas expectativas para ser utilizada en la construcción de dispositivos para la solución de problemas específicos en diferentes áreas y en el desarrollo de tecnologías emergentes. De esta manera, la nanociencia ha dado lugar a una nueva área de la tecnología denominada *nanotecnología*.

#### NANOCÚMULOS, NANOPARTÍCULAS Y NANOMATERIALES

La materia en la escala nanométrica se presenta como agregados con un número finito de átomos que forman un sistema ligado y estable debido a las fuerzas electromagnéticas generadas por las distribuciones de carga de los núcleos y electrones participantes. Para clasificar y caracterizar este nuevo estado de la materia se pueden considerar 3 variables: la composición o tipo de átomos, el número de ellos y las dimensiones espaciales o tamaño del cúmulo o agregado.

Actualmente, es posible sintetizar de manera controlada un agregado utilizando un número predeterminado de átomos de cualquier elemento químico de la tabla periódica. Esto implica que puede haber agregados o cúmulos formados por combinaciones de 2 o más átomos. El número de

átomos en el agregado puede ser desde 2 hasta varios miles de ellos. Esto dará lugar a agregados de diferente tamaño que puede ir desde  $\sim 0.5$  hasta 50–100 nm. En una primera clasificación se encuentran los nanocúmulos representados por la fórmula:  $A_n B_m C_p$ , que indica que está formado por  $n$  átomos A,  $m$  átomos B y  $p$  átomos C, donde A, B y C pueden ser cualquier elemento de la tabla periódica, y  $n$ ,  $m$  y  $p$  son números enteros entre 1 y 1 000. Por lo tanto, es posible saber con precisión el número y tipo de átomos que constituyen un nanocúmulo.

Adicionalmente existen las nanopartículas, que se clasifican de acuerdo con su tamaño expresado en nanómetros. En este caso no se sabe el número exacto de átomos que la forman, solamente su tamaño. Cuando los nanocúmulos o nanopartículas forman arreglos estables debido a algún mecanismo de autoensamblaje, se pueden formar los nanomateriales o materiales nanoestructurados, que pueden tener dimensiones de hasta varios milímetros.

Una de las características más interesantes de los nanocúmulos y nanopartículas es que, para una composición y tamaño fijos, pueden adoptar diferentes morfologías, es decir, se pueden tener estructuras donde los átomos ocupan diferentes posiciones geométricas, ver figura 41.1a. Por ejemplo, un cúmulo de 55 átomos de oro,  $Au_{55}$ , puede encontrarse en una configuración de icosaedro, cuboctaedro, o formando una configuración de baja o nula simetría estructural. Estas diferentes formas estructurales se denominan *isómeros* del cúmulo  $Au_{55}$ .

Los isómeros de un nanocúmulo se pueden entender y clasificar como estructuras que corresponden a mínimos locales de la superficie de energía potencial que describe sus interacciones interatómicas. Además, las propiedades de los nanocúmulos cambian con su tamaño o número de átomos que los constituyen, es decir, el cúmulo  $A_n$ , se comporta muy diferente al cúmulo  $A_{n-1}$  o al  $A_{n+1}$ . Por lo tanto, se dice que en estos sistemas la disminución o el aumento de un solo átomo cuenta en su comportamiento. Esta propiedad de la materia en la escala nanométrica es uno de los temas más fascinantes y difíciles de entender, a tal grado que en la actualidad no se cuenta con una teoría que pueda predecir las propiedades de los nanocúmulos como función de su número de átomos. De hecho, el estudio de los nanocúmulos es aún más interesante, dado que también se ha encontrado que sus propiedades, para un tamaño dado, dependen de su número de electrones. Por ejemplo, la geometría más estable del cúmulo  $Au_7$  (neutro) es diferente de la del cúmulo catiónico  $Au_{7+}$  (con un electrón menos) y de la del aniónico  $Au_{7-}$  (con un electrón más), ver figura 41.1b.



**Figura 41.1:** (a) Isómeros de nanocúmulos de oro:  $\text{Au}_{28}$ ,  $\text{Au}_{38}$ ,  $\text{Au}_{55}$  y  $\text{Au}_{75}$ . Se muestra la diferencia en energía, en eV, entre las 2 estructuras de más baja energía. Para  $n = 55$  y  $75$ , el isómero de mayor energía tiene simetría rotacional de orden 5, icosaedrales y decaedrales, respectivamente. Para cada isómero se indica el grupo de simetría puntual de su estructura. (b) Estructuras más estables del nanocúmulo de oro con 7 átomos: de izquierda a derecha: catión, neutro y anión.

## EFFECTOS DE TAMAÑO FINITO

El comportamiento novedoso de los nanocúmulos y nanopartículas mencionado anteriormente se puede explicar en base a los efectos de tamaño finito. Estos se pueden separar en tres tipos: el cociente entre el número de átomos en la superficie y en el volumen, el confinamiento cuántico y el comportamiento termodinámico anómalo al tenerse un número finito de átomos en la nanopartícula. Veamos cada uno de ellos con más detalle.

Para entender por qué los nanocúmulos y nanopartículas son sistemas con propiedades diferentes, respecto a la materia macroscópica, se puede considerar la diferencia que existe entre los átomos que se encuentran en su superficie y aquellos que se encuentran en su interior, es decir, rodeados en su totalidad por otros átomos. De esta manera, al examinar sistemas cuyas dimensiones se van reduciendo a escalas nanométricas, la propor-

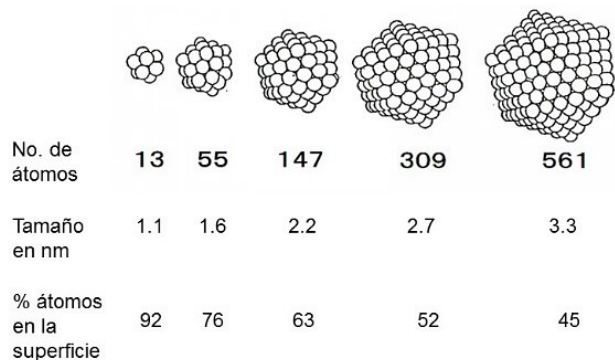


ción de átomos en su superficie con respecto a los átomos en su volumen va aumentando. Este cociente se puede incrementar hasta que el comportamiento del nanomaterial está dominado por los átomos de la superficie, mientras que las propiedades de los materiales macroscópicos (bulto) se deben fundamentalmente a los átomos tipo volumen, ver figura 41.2.

El confinamiento cuántico de los electrones en la materia a escala nanométrica también es diferente al variar su comportamiento desde lo que se observa en átomos individuales hasta el que se tiene en la materia condensada con  $\sim 10^{23}$  átomos/cm<sup>3</sup>. En el caso de los átomos, los electrones ocupan estados cuánticos con energías específicas, generando un espectro de niveles de energía discreto. En un sólido macroscópico, en cambio, estos niveles se transforman en las llamadas bandas electrónicas, dentro de las cuales los electrones adquieren valores continuos de energía. En una nanopartícula, con un número finito de electrones, se tiene confinamiento cuántico que da lugar a una estructura de niveles electrónicos intermedia entre niveles discretos y bandas continuas. Es decir, la separación entre niveles sigue siendo discreta, pero la densidad de ellos por unidad de energía aumenta. Este confinamiento cuántico peculiar genera propiedades electrónicas, ópticas, químicas y de transporte electrónico que dependen del tamaño, y son diferentes con respecto a las conocidas a nivel macroscópico.

¿ Por que las propiedades de los nanocúmulos son diferentes ?

Por la mayor proporción de átomos de superficie respecto a los de volumen



**Figura 41.2:** Estructuras de nanocúmulos con geometría icosaedral. Estas estructuras se han encontrado en nanocúmulos de plata.

Por otro lado, las propiedades termodinámicas de sistemas con un número reducido de átomos no siguen el comportamiento usual de la materia

macroscópica al no encontrarse en el límite termodinámico, donde el número de átomos y la densidad tienden a infinito, pero su cociente mantiene un valor constante. Por esta razón, las propiedades “termodinámicas” de las nanopartículas requieren de un estudio y análisis especial, que incluye la reinterpretación de conceptos como temperatura, presión, calor específico, transiciones de fase, puntos críticos, entre otros. De hecho, la introducción de nuevos conceptos físicos para entender las propiedades termodinámicas en la nanoescala es uno de los mayores atractivos hoy en día, para realizar investigación de frontera en nanociencia.

#### MÉTODOS EXPERIMENTALES PARA ESTUDIAR NANOPARTÍCULAS

El primer paso para el estudio experimental de la materia en la nanoescala consiste en tener disponibles estos sistemas en el laboratorio. Para ello, se requiere contar con métodos de síntesis de nanoestructuras que tengan la capacidad de controlar su tamaño y composición. Un ejemplo concreto sería el hacer estudios experimentales de las propiedades de cúmulos de plata en el rango de tamaños de 10–100 átomos. Entonces la pregunta sería ¿cómo se pueden fabricar estos sistemas en el laboratorio de manera controlada?

Actualmente existen 2 métodos para esta implementar esta síntesis. Uno de ellos es el método físico, mediante el cual se puede lograr la condensación de agregados con  $n$  átomos de Ag en estado gaseoso. Este proceso de condensación, en general, produce otro gas de agregados que forman un haz supersónico compuesto por una distribución de tamaños. En la siguiente etapa se requiere la separación de tamaños específicos, lo cual se logra ionizando el gas de agregados, y mediante arreglos de campos eléctricos y magnéticos apropiados se logra la separación en forma análoga a la técnica conocida como espectrometría de masas. Una vez realizada la separación de tamaños, es posible depositarlos en un sustrato determinado o atraparlos en trampas cuadrupolares electromagnéticas. En ambos casos, los agregados están en las condiciones adecuadas para ser analizados con diferentes técnicas como microscopía electrónica, o de efecto túnel, así como con diferentes tipos de espectroscopías, que utilizan electrones o radiación electromagnética de diferente longitud de onda.

Otro método muy utilizado es la síntesis de nanoestructuras mediante la reacción química de diferentes reactivos. Para la purificación y separación de tamaños existen otros métodos químicos que permiten este control. En este tipo de síntesis las nanopartículas normalmente se encuentran disuel-

tas en una solución que también puede depositarse en sustratos adecuados para su caracterización con diferentes técnicas experimentales. Un avance importante reciente fue la cristalización de nanocúmulos de oro cuya superficie fue protegida con moléculas orgánicas. Al contarse con un cristal periódico, fue posible utilizar la técnica conocida como difracción de rayos X, con la cual se determina de manera confiable y precisa la estructura atómica de dichos nanocúmulos. Este proceso experimental es muy utilizado actualmente en la fabricación controlada de nanocúmulos metálicos y semiconductores.

#### MÉTODOS TEÓRICOS PARA ESTUDIAR NANOPARTÍCULAS

El estudio teórico de nanocúmulos y nanopartículas requiere de una descripción confiable de su energía potencial, que tome en cuenta las interacciones entre los átomos constituyentes. Para ello se han desarrollado dos enfoques complementarios: el mecánico cuántico, que se basa en describir a cada uno de los átomos como un sistema formado por un núcleo más sus electrones correspondientes. Su energía potencial se genera a partir de la interacción electromagnética total entre todos los núcleos y electrones participantes.

El otro enfoque, apropiado para nanopartículas con un número mucho mayor de átomos, es el denominado atomístico, en el cual se construye la energía potencial como función de las posiciones espaciales de los átomos. La energía potencial de interacción se modela a partir de un análisis del enlace químico que depende del tipo de átomos en el sistema. Una vez construida la energía potencial, se localiza su mínimo global y mínimos locales, los cuales dan información de las configuraciones atómicas energéticamente estables. Adicionalmente, un análisis matemático de la curvatura del mínimo global permite el cálculo de los modos vibracionales de la nanopartícula. Mediante algoritmos y métodos numéricos adecuados es posible resolver las ecuaciones de movimiento de cada uno de los átomos de la nanopartícula utilizando las fuerzas derivadas de la energía potencial. La solución de estas ecuaciones permite obtener la posición y el momentum de cada átomo como función del tiempo. Esta información puede ser utilizada para calcular diversas propiedades observables de las nanopartículas mediante promedios temporales, siguiendo el procedimiento de la metodología conocida como dinámica molecular.

La descripción mecánico-cuántica es factible cuando el número máximo de átomos en el nanocúmulo es no mayor a  $\sim 500$ , debido al alto costo

computacional que requiere la solución de la ecuación de Schrödinger para un sistema con un número considerable de núcleos y electrones. Para ello, se utiliza una aproximación muy confiable conocida como teoría de funcional de la densidad, donde la densidad electrónica de todo el sistema determina las propiedades físicas del nanocúmulo en su estado base. Con este método es posible determinar no solo las propiedades estructurales y vibracionales, sino también las electrónicas y magnéticas, y en su versión dependiente del tiempo, las ópticas y de transporte electrónico.

#### EJEMPLOS DE PROPIEDADES FÍSICAS NOVEDOSAS

Mediante la utilización de las metodologías teóricas y experimentales mencionadas anteriormente se han encontrado propiedades fisicoquímicas novedosas para nanocúmulos y nanopartículas. A continuación, se mencionan brevemente algunas de ellas.

**Propiedades estructurales:** En los sólidos cristalinos macroscópicos las estructuras periódicas tienen varios tipos de simetría, incluyendo la rotacional con ejes de orden 2, 3, 4 y 6. En nanocúmulos y nanopartículas se ha encontrado que las configuraciones de mayor estabilidad estructural corresponden a icosaedros y decaedros con simetría rotacional de orden 5.

**Propiedades vibracionales:** En cristales periódicos la densidad de estados vibracionales en la región de bajas frecuencias se puede describir mediante el modelo de Debye, que propone una variación cuadrática con la frecuencia empezando desde un valor cero. En contraste, se ha encontrado que, debido al tamaño finito de las nanopartículas, el valor mínimo de sus frecuencias vibracionales no puede ser cero.

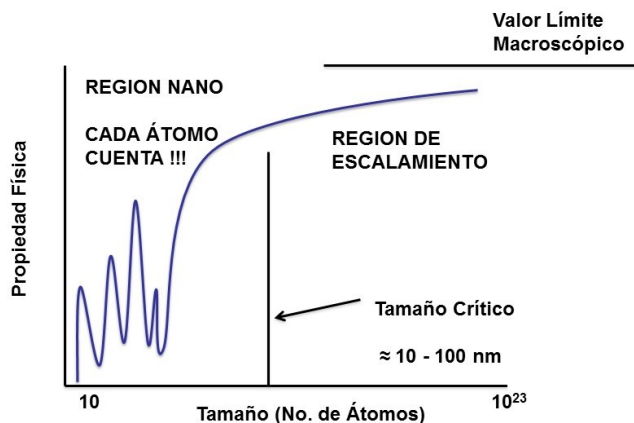
**Propiedades termodinámicas:** La temperatura de fusión (transición sólido-líquido) de nanocúmulos es diferente a la del sólido correspondiente. Esta temperatura depende del tamaño del nanocúmulo, tiene un comportamiento irregular y en general es menor que la del bulto, aunque hay ejemplos interesantes en donde puede ser mayor.

**Propiedades ópticas:** Las frecuencias de la radiación electromagnética que pueden ser absorbidas (o reflejadas), dependen del tamaño de la nanopartícula, lo cual es resultado del diferente confinamiento cuántico de los electrones en el sistema.

## APLICACIONES Y PERSPECTIVAS

Las nuevas propiedades de nanocúmulos y nanopartículas han empezado a ser utilizadas en diferentes áreas tecnológicas, generando el área conocida como nanotecnología. Algunas de las aplicaciones más conocidas han conducido a productos específicos que pueden ser adquiridos en centros comerciales. Por ejemplo, televisiones con imagen de ultra alta definición cuyas pantallas están fabricadas utilizando puntos cuánticos, que corresponden a nanopartículas con propiedades de semiconductores. También se han comercializado lavadoras de ropa con recubrimientos de nanopartículas de plata que aumentan su capacidad bactericida.

Otras aplicaciones en desarrollo, y que en el futuro tendrán un gran impacto se ubican en el área de la nanomedicina. En este caso, las nanopartículas metálicas de diferente forma y funcionalizadas adecuadamente se están utilizando en terapias anti-cáncer, como sensores biológicos y como portadores de sustancias activas. En áreas como la del desarrollo de nuevas fuentes de energía, nanoelectrónica y la generación de nuevos nanocatalizadores para la industria química, los nanocúmulos y nanopartículas también están empezando a ser utilizadas.



**Figura 41.3:** Se muestra el comportamiento típico de las propiedades físicas de nanocúmulos como función de su tamaño (línea azul). Nótese que existe un tamaño crítico por debajo del cual se presentan variaciones irregulares, mientras que, por arriba de él, las propiedades físicas convergen de manera suave hacia el valor límite del bulto. En esta región pueden existir leyes de escalamiento apropiadas para alcanzar el valor macroscópico. Por otro lado, en la región nano, cada átomo cuenta y no es posible encontrar una ley de escalamiento.

No obstante el enorme progreso alcanzado durante los últimos 50 años en el desarrollo de la nanociencia y nanotecnología, es evidente que apenas se están dando los primeros pasos en la investigación en estas áreas, faltando mucho por descubrir y entender. Entre los principales retos a encarar durante los próximos años se encuentran, a nivel experimental, el sintetizar nanoestructuras con un control total de su composición, tamaño, forma y estabilidad. Desde un punto de vista teórico, el reto principal es la generación de nuevos conceptos apropiados para describir los nuevos fenómenos existentes en la nanoescala. Adicionalmente, se requiere contar con una teoría que explique el comportamiento irregular de las propiedades de los nanocúmulos y nanopartículas como función de su tamaño, y que permita predecir como es la evolución de ellas hacia su valor macroscópico, ver figura 41.3.

PARA SABER MÁS:

- Casero Junquera, E., Briones Llorente, C., Serena Domingo, P., Martín-Gago, J. A., *El Nanomundo en tus Manos: Las claves de la Nanociencia y Nanotecnología*, Grupo Planeta, Madrid, 2014.
- Wolf, E. L., *Nanophysics and Nanotechnology, An Introduction to Modern Concepts in Nanoscience*, Wiley-VCH, Weinheim, 2015.

REFERENCIAS

- [1] R. L. Johnston, *Atomic and Molecular Clusters*. London; New York: CRC Press, abr. de 2002.
- [2] Y. Kawazoe, T. Kondow y K. Ohno, eds., *Clusters and Nanomaterials: THEORY and Experiment*, ép. Springer Series in Cluster Physics. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2002.
- [3] S. N. Khanna y A. W. Castleman, eds., *Quantum Phenomena in Clusters and Nanostructures*, ép. Springer Series in Cluster Physics. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2003.

## VIII

# LAS PARTÍCULAS ELEMENTALES Y LA FÍSICA DE ALTAS ENERGÍAS





**ACELERADORES DE PARTÍCULAS***Matías Moreno\**

**Se presenta una introducción a los aceleradores de partículas haciendo énfasis en las nociones fundamentales que los hacen útiles para la ciencia y la tecnología en múltiples áreas. Se hace un esbozo histórico del desarrollo de los mismos con el doble objetivo de dar una visión panorámica de su evolución y de introducir un conjunto de conceptos para poder tener una comprensión del tema.**

Entre las herramientas más versátiles en el desarrollo científico y tecnológico se encuentran sin duda los aceleradores de partículas. Estos aparatos son mucho más comunes de lo que a primera vista apreciamos. En efecto, cuando utilizamos una corriente eléctrica, ésta debe haberse producido en un proceso en que cambiamos la velocidad de los portadores de carga, esto es, debieron ser acelerados y el proceso que los aceleró puede ser llamado un acelerador. En esta sección nos centraremos en un tipo de acelerador macroscópico que fue desarrollado inicialmente a finales del siglo XIX, sus partes esenciales son:

Primero, un mecanismo que separa las cargas eléctricas que se encuentran mezcladas en la materia produciendo una corriente positiva, una negativa o ambas. Es común que el procedimiento de separación de cargas anterior tenga la corriente negativa hecha con electrones y la positiva por los iones que perdieron dichos electrones. Un procedimiento típico pero no único para hacer esta separación es calentando un metal en un fenómeno llamado termoiónico. A esta parte del acelerador se le llama la Fuente, que puede ser de iones o de electrones.

La segunda etapa es propiamente la de aceleración. Esta parte del proceso se lleva a cabo en uno o más pasos dependiendo del uso que le queramos dar a las partículas. Se puede avanzar un buen trecho en el entendimiento

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

y, por lo tanto, en el control de estas partículas aceleradas con dos de los grandes temas de la física: la mecánica clásica y el electromagnetismo, de hecho con dos leyes de la física: La segunda ley de Newton y la fuerza de Lorentz:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}, \quad (42.1)$$

$$\mathbf{F} = q \left( \mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right), \quad (42.2)$$

donde  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ ,  $m$  la masa relativista,  $q$  la carga eléctrica,  $c$  la velocidad de la luz y  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{B}$  un campo electromagnético externo arbitrario en unidades gaussianas<sup>1</sup> para las cuales  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{B}$  tienen las mismas unidades (gauss). La primera ecuación es la familiar segunda ley de Newton escrita en una forma que se generaliza al régimen relativista y la segunda ecuación es la generalización de la ley de Coulomb para una partícula puntual moviéndose en presencia de campos eléctrico y magnético arbitrarios; que, así escrita, es válida también en el caso velocidades arbitrarias.

La primera consecuencia importante de estas ecuaciones es que el campo magnético no puede hacer trabajo sobre la partícula y, en ausencia de campo eléctrico, la energía de cada partícula en el haz se conserva. Esta conservación sin embargo es aproximada pues olvida que una partícula con carga eléctrica radía ondas electromagnéticas con una potencia emitida,  $P$ , dada por la fórmula de Larmor

$$P = \frac{2}{3} q^2 \frac{\dot{\mathbf{v}}^2}{c^3}, \quad (42.3)$$

donde  $\dot{\mathbf{v}}$  es la aceleración de la partícula<sup>2</sup>.

Una vez que se logra acelerar el haz, se le utiliza en múltiples formas; las características del acelerador con frecuencia son definidas por la aplicación. Este aspecto, los usos, hace de los aceleradores una herramienta, a la vez, versátil e indispensable. Éstos van desde la investigación científica más pura en la frontera del conocimiento, como se hace en la física de partículas elementales, pasando por la caracterización de materiales, por ejemplo en el caso del estudio de un espécimen de interés antropológico y en, literalmente, miles de diferentes aplicaciones.

<sup>1</sup>En las unidades del Sistema Internacional (o MKS racionalizadas) no aparece  $c$  en la fuerza de Lorentz.

<sup>2</sup>El lector puede transformar esta ecuación al Sistema Internacional con la sustitución formal:  $q^2 \rightarrow q^2/4\pi\epsilon_0$ .

Una notable característica de los aceleradores es que en buena medida son escalables y que a menudo su configuración permite hacer de manera simultánea múltiples experimentos y estudios. Tal es el caso de los Anillos de Colisión de Hadrones, por ejemplo en Fermilab o en CERN, o en las Fuentes de Luz de Sincrotrón donde un haz de electrones es manipulado por campos magnéticos para que produzca luz brillantísima. En el último caso, el haz se confina a una órbita cerrada y se utiliza en repetidas ocasiones; el producto buscado es la luz radiada por el haz, la cual a su vez se aprovecha en decenas de experimentos colocados en torno al circuito del haz de electrones.

#### EL DESARROLLO DE LOS ACELERADORES

Hagamos ahora un viaje en el tiempo que ilustra aspectos importantes del surgimiento y del desarrollo de los aceleradores y que los muestra entre los instrumentos más relevantes de la ciencia y la tecnología modernas. En un sentido estricto podríamos decir que cada vez que una chispa se produce tenemos aceleración de carga y que por lo tanto un rayo en una tormenta es un acelerador natural, me ceñiré aquí al sentido más convencional que es el de un acelerador de arteificio, producido entonces por el arte, el conocimiento y la ciencia.

#### Los orígenes decimonónicos

Los primeros aceleradores fueron desarrollados e inventados en la segunda mitad del siglo XIX, cuando se tuvo una forma de extraer los rayos  $\beta$ , hoy identificados como constituidos por electrones. En efecto, si se calienta un filamento metálico y se le somete a una diferencia de potencial relativamente pequeña —una batería, un conjunto de ellas o un generador— uno logra emitir los electrones del metal. Apegándonos un poco más a la historia, la fuente de voltaje que fue de uso común en esa época fue un generador de alto voltaje, ya que el calentamiento del filamento metálico sólo se usó hasta finales del siglo XIX y principios del XX; la ventaja de este pequeño truco es que el alto voltaje ya no es tan grande.

En ese período se produjeron los primeros aceleradores, con sus partes básicas hechas, por estándares modernos, en miniatura: una fuente de partículas y una sección de aceleración; estos elementos suponían el desarrollo previo de técnicas de vacío y una fuente de alto voltaje. Así J. J. Thompson descubrió el electrón a finales de ese siglo modificando y mejorando un tubo de rayos catódicos llamado tubo de Crookes. Estos tubos, precursores

de los bulbos, a diferencia de éstos, requerían un alto voltaje para desprender los electrones “fríos” del cátodo. Además de usos científicos, tales tubos fueron usados como objetos de diversión y artísticos que, por supuesto, también abrieron el paso a múltiples descubrimientos: Entre ellos el de Wilhelm Röntgen quién descubrió los rayos X, ver figura 42.1.



**Figura 42.1:** El desarrollo de los tubos de rayos catódicos llevó a Wilhelm Röntgen a descubrir los rayos X. Esta es la primera radiografía del uso médico de los rayos X tomada el 22 de diciembre de 1895: la mano de Anna Bertha Ludwig, esposa de Röntgen.

La región en donde los electrones se aceleran está entre el elemento metálico (el cátodo) y una rejilla formada por un tejido suelto de metal, que se convierte en el ánodo hacia donde viajan los electrones, los cuales adquieren una energía igual al producto de la carga del electrón,  $e$ , veces el potencial entre el ánodo y el cátodo,  $V$ . Esta energía es  $E = e \times V$ , como la carga del electrón es  $e = 1.6021 \times 10^{-19}$  Coulombs, por cada voltio de aceleración tendremos un aumento en la energía del electrón de  $E_e = 1.6 \times 10^{-19}$

joules; esta cantidad de energía es muy común y se llama 1 eV o un electrón-voltio. Por comparación, la masa de un electrón en reposo es, de acuerdo a la relatividad especial de Einstein,  $m_e c^2 = 0.511 \times 10^6$  eV, mientras que la energía de amarre de un electrón en un átomo de hidrógeno, la cual da una escala para las reacciones químicas, es proporcional a la energía de Bohr  $E_B = 13.6$  eV; de esta forma las energías típicas de un proceso químico están generalmente asociadas a valores no relativistas de la energía de los electrones. El desarrollo científico hasta principios del siglo XX estuvo dominado por energías de un tamaño comparable a la escala  $E_B$ . A partir del descubrimiento de la radioactividad, esta escala en la energía de los fenómenos observados y controlados en los laboratorios cambió en un factor de cien mil para dar una escala energética de los fenómenos nucleares en el intervalo de los MeV ( $1 \text{ MeV} = 10^6$  eV o un millón de eV). Esta nueva escala motivó la búsqueda de nuevos aceleradores de mayor energía.

En el conocimiento de la materia a distancias cada vez más pequeñas se requiere de energías cada vez mayores, la razón de este fenómeno se puede trazar al principio cuántico de Heisenberg de acuerdo al cual  $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ , si la partícula que causa la interacción tiene una masa despreciable  $\Delta p c \approx \Delta E$ , entonces la relación de Heisenberg se puede reescribir como  $\Delta x \Delta E \geq \hbar c$ . Como numéricamente  $\hbar c = 1970 \times 10^{-10} \text{ eV} \cdot \text{m} = 1970 \text{ eV} \cdot \text{Å} = 197 \text{ MeV fm}$ , podemos entender la regla entre las escalas de longitud Åmstrong ( $10^{-10}$  m) y femtómetros ( $10^{-15}$  m) y la energía típica que se requiere para estudiarlas: keV en física atómica y MeV para física nuclear.

Es posible hacer una analogía entre la física cuántica y la óptica pues ambas son teorías que satisfacen ecuaciones de onda lineales lo que lleva a que en la óptica tengamos una relación entre la posición y el número de onda  $\Delta x \Delta k \geq 1$ , mientras que la relación equivalente que se usa para los fenómenos cuánticos es  $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ ; la analogía se comprende mejor si recordamos la fórmula de de Broglie  $p = \hbar k = h/\lambda$ , con  $\lambda$  la longitud de onda de Broglieana.

## Siglo XX

La física de aceleradores ha construido las herramientas para estudiar fenómenos de cada vez más alta energía. Así, entre 1932 y 2018 se pasó de una energía máxima de 1 MeV, obtenida en los primeros ciclotrones en California, a diez millones de MeV, esto es 10 TeV, que se logra hoy en el laboratorio europeo CERN en la frontera suizo-francesa.

Los rayos X permitieron hacer uno de los experimentos clave de la física cuántica; por ejemplo, el efecto Compton (1923), con el que se confirmó

que también la radiación electromagnética, la luz, tiene efectos de partícula: la famosa dualidad onda-partícula. Esta dualidad se cumple también para los electrones. En efecto, los microscopios electrónicos tienen como base un acelerador de partículas y configurados para estudiar un cristal se difractan en él, evidenciando su carácter ondulatorio.

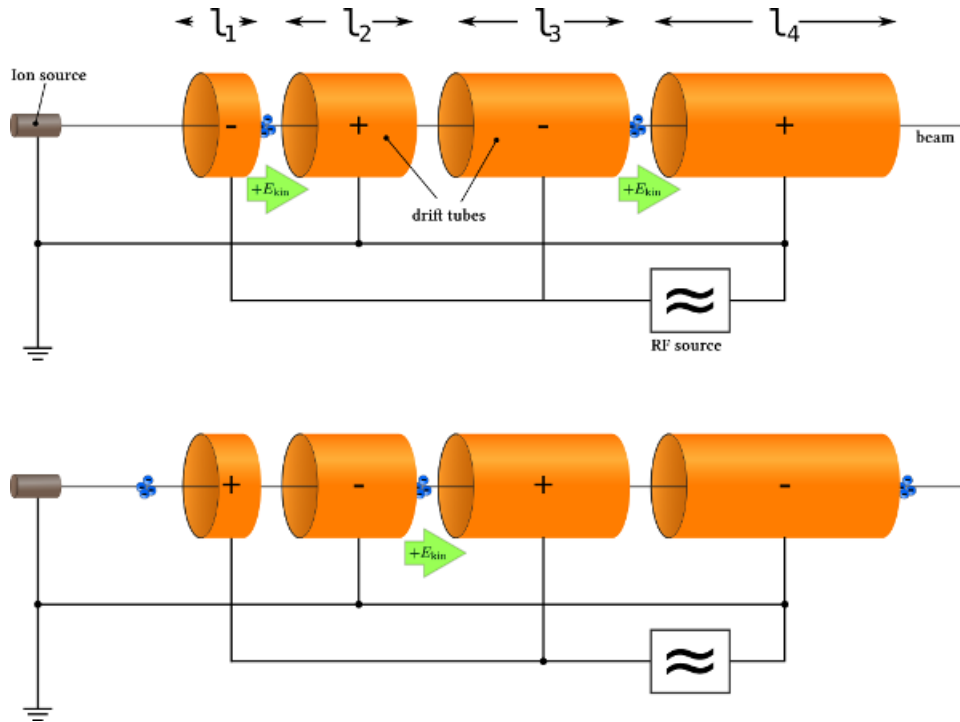
La década de 1920 vio un desarrollo importante de los aceleradores de partículas. Por un lado, se logró acelerar los iones atómicos utilizando los aceleradores Cockcroft-Walton y Van de Graaff. El primero, desarrollado en el Reino Unido, usa un sistema de rectificadores para lograr un alto voltaje y en él se acelera un paquete de iones cuya carga determina la aceleración del paquete. Este método fue utilizado para producir la primera reacción nuclear artificial en 1932. Tal sistema se usó como fuente de protones hasta la década de 1980 en laboratorios de altas energías.

El Van de Graaff, desarrollado en Estados Unidos, usa una banda o tira de material aislante, típicamente caucho, que se carga eléctricamente por frotamiento. La banda se mueve con un motor y la carga se transfiere al interior de una gran esfera metálica, estas cargas emigran al exterior de la esfera lo que produce un ultra-alto voltaje en ella. Éste puede ser de varios MeV. El ultra-alto voltaje produce el campo eléctrico en el que se aceleran los iones deseados. El límite para este sistema está dado por el máximo campo eléctrico que los materiales pueden soportar antes de producir una chispa, éste es de unos cien MeV por metro que, en la práctica, se traduce en decenas de MeV por metro.

Una modificación del Van de Graaff es el Tandem en el que una vez acelerados los iones se les carga con carga opuesta y la diferencia de potencial se aprovecha para multiplicar la energía total de los iones. Otro avance se logra cambiando la banda transportadora de carga a una con anillos metálicos, esta configuración se conoce como un Pelletron.

Uno de los métodos para resolver las limitaciones de los aceleradores electrostáticos son los aceleradores lineales. En 1924 G. Ising propuso acelerar partículas con una serie de campos eléctricos oscilantes, esta idea fue llevada a la práctica por Widerøe en Achen, Alemania en 1929. Estos aparatos tienen múltiples aplicaciones en ciencia y en medicina. En aceleradores de mayor tamaño, se usan para inyectar los haces acelerándolos desde la fuente hasta una energía nominal, que en el caso de electrones puede ser de unos 100 MeV. El Stanford Linear Accelerator Center (SLAC) tuvo durante décadas el acelerador más largo de 2 millas (3.2 km) de longitud; éste aún es funcional y se usa una parte de él para alimentar a un Láser de Electrones Libres. El límite para estos aceleradores es sobre todo económico y

geográfico.



**Figura 42.2:** Esquema del principio de funcionamiento de un acelerador lineal, la figura superior muestra la configuración de los potenciales eléctricos cuando los paquetes entran a los tubos de deriva (drift tubes); en la figura inferior indica como han cambiado dichos potenciales cuando los paquetes salen de los tubos de deriva.

En la figura 42.2 se muestra un esquema del funcionamiento de un acelerador lineal, también llamado "linac". Siguiendo la idea de Ising se tiene una serie de cavidades de ondas que reciben la señal de una guía de ondas y las cavidades alternan su campo. A bajas energías las cavidades son de distinto tamaño, de forma que el paquete de partículas a acelerar entra a la cavidad cuando el campo eléctrico las acelere hacia adelante. Durante el tiempo que se mantiene el paquete en esa cavidad el campo está dirigido en el mismo sentido. En las cavidades vecinas inmediatas, el campo apunta en la dirección opuesta. Al finalizar el recorrido en una cavidad, en ésta se cambia el sentido del campo, pero el paquete entra a la siguiente cavidad que en ese momento tiene el campo adecuado para seguir acelerando al paquete de partículas. Todo este proceso requiere de una sincronización y un diseño de las cavidades y de las guías de onda de gran precisión en tiempo

y en espacio. En la figura 42.3 se muestra el acelerador lineal que preacelera iones de hidrógeno negativo en el laboratorio Fermilab.



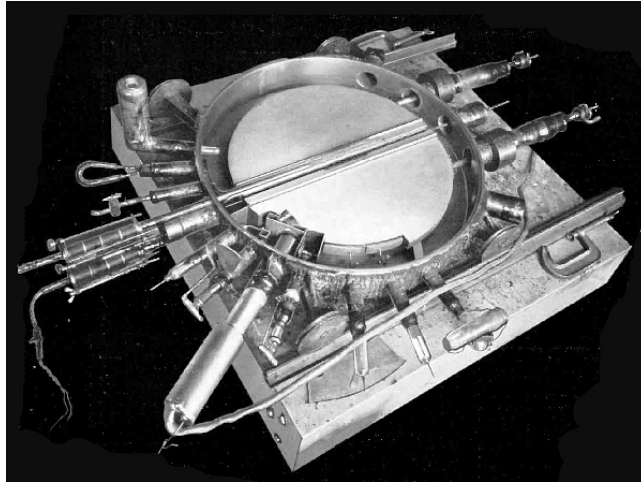
**Figura 42.3:** Algunos módulos de los tubos de deriva (drift tubes) en el acelerador lineal de Fermilab, el haz usual es de iones de hidrógeno negativo,  $H^-$ , en el diseño original era alimentado por un acelerador electrostático del tipo Cockroft-Walton.

El costo de los aceleradores lineales, con sus múltiples regiones de aceleración, lleva a buscar diseños en los que las cavidades aceleradoras y las líneas de transporte sean reutilizadas acelerando en múltiples ocasiones el haz de partículas y abatiendo de esa forma los costos del equipo. Para lograrlo se guía el haz de partículas en un circuito confinado por la parte magnética de la fuerza de Lorentz. Esto da como resultado un acelerador cíclico. El primer aparato de este tipo fue construido por E. O. Lawrence y W.S. Livingston en 1932 en Berkeley, California; este primer ciclotrón y los descubrimientos que con los sucesivos y más poderosos ciclotrones se lograron, le valieron a Lawrence el premio Nobel de 1939, ver figuras 42.4 y 42.5.

La zona de aceleración de un ciclotrón está en el diámetro del círculo formado por las dos letras "D", llamadas las Des, que son dos sectores



metálicos huecos a las que se les aplica un voltaje alterno de alta frecuencia. Dentro de las Des, las partículas hacen una trayectoria semicircular a velocidad (casi) constante producida por un campo magnético uniforme. Cuando las partículas llegan al límite de separación entre las Des, la polaridad del potencial entre ellas se cambia y las partículas son aceleradas en el espacio entre ellas; ahora las partículas generan un semicírculo de radio mayor que en la De previa y así sucesivamente hasta salir hacia un blanco habiendo sido aceleradas múltiples ocasiones. La frecuencia de operación está dada por la frecuencia de ciclotrón  $\omega = qB/mc$ , que es, en la práctica constante mientras las velocidades sean no relativistas, pues la masa  $m$  es la masa relativista.

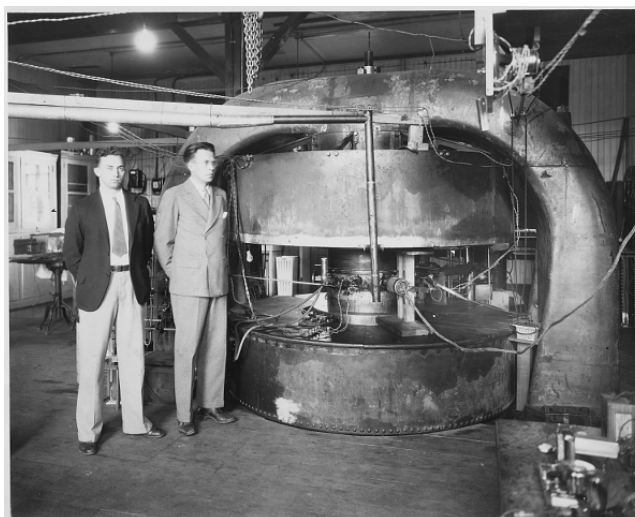


**Figura 42.4:** El primer ciclotrón exitoso construido por Lawrence en California mide de 69 cm de diámetro y está formado por dos "Des". No se muestran los electroimanes que producen el campo magnético.

El diseño fue económicamente un éxito respecto a los aceleradores lineales, pero resultaron ser sobre todo una fábrica de resultados científicos y técnicos extraordinario. Entre otros hallazgos, muchos elementos transuránicos fueron encontrados en estos aparatos. Ellos marcaron la frontera del conocimiento hasta la década de 1950. Pero a mayores energías el problema de la frecuencia variable en el ciclotrón requirió introducir un diseño modificado. Dicho rediseño se hace indispensable cuando los iones acelerados alcanzan velocidades relativistas.

El nuevo diseño se buscó por dos caminos: Primero modificando los campos magnéticos para mantener la frecuencia de ciclotrón inicial cons-

tante, estos son los ciclotrones isócronos o isociclotrones, que tienen la característica de permitir altas corrientes y se usan en aceleradores modernos como TRIUMF en Canadá, RIKEN en Japón y en el PSI de Suiza. La segunda posibilidad es ajustar la frecuencia de la radio frecuencia usada en la sección de aceleración entre las Des, estos aceleradores son llamados sincrociclotrones y tienen la propiedad de que a mayor energía, la frecuencia de ciclotrón varía como  $f = f_0 m_0 c^2 / E = f_0 \sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}$ .



**Figura 42.5:** M. Stanley Livingston y E.O. Lawrence con el ciclotrón de 69 cm y los imanes que guían el haz. El ciclotrón de la figura previa está entre los dos electroimanes que son los grandes cilindros superior e inferior.

#### Enfocando y desenfocando

A principios de la década de 1950 se formuló un método que revolucionó la manera de construir aceleradores. Se trató del método de enfocamiento fuerte del haz de partículas. Este enfocamiento se puede entender por una analogía con la óptica. En efecto, si analizamos la lente de una cámara moderna, ésta estará formada en realidad por una lente compuesta por varias lentes unas de ellas convergentes y otras divergentes que, además de minimizar aberraciones logran un efecto de enfoque de la imagen con una longitud total de la lente compuesta mucho menor a la de un solo elemento. En un haz de partículas en presencia de campos magnéticos no uniformes se tiene que buscar como contrarrestar tanto el efecto de los campos mag-

néticos que generan fuerzas perpendiculares a la órbita de diseño, como de otras imperfecciones del sistema (alineamiento de los imanes, cargas espejo, etc.), pues éstos pueden sacar a las partículas de dicha órbita y con ello degradan la calidad del haz. La cantidad que mide estas desviaciones de la órbita de diseño se llama la emitancia; ésta es el producto del tamaño medio del haz por la velocidad media de las partículas en una dirección dada. Al tener tres direcciones en cada punto de la órbita tendremos tres emitancias, dos transversales (perpendiculares), y una longitudinal (a lo largo) de la órbita de diseño. A menor emitancia, mayor es la calidad del haz pues en ese caso menos partículas se alejan de la dirección de diseño.

La idea del enfocamiento fuerte es entonces usar un imán que produzca un campo magnético cuadrupolar, éste tiene la propiedad de enfocar el haz en una de las direcciones transversales y desenfocarlo en la otra, por lo que, con un sólo imán cuadrupolar se gana poco. Pero si se agrega un segundo cuadrupolo que desenfoque en la primera dirección y enfoque en la segunda, se puede lograr que el resultado neto en las dos direcciones transversales sea un enfoque en ambas. La analogía óptica no es completa pero funciona bien en cada dirección transversal.

La segunda dificultad que se debió resolver para aumentar aun más la energía del haz producido en un ciclotrón o sus variantes, hizo inviable su construcción. Por un lado la geometría del acelerador implica campos magnéticos grandes y éstos tienen un límite de unos cuantos Teslas (1 Tesla son 10 000 Gauss) y, en consecuencia, no se pueden hacer ciclotrones compactos aumentando la intensidad del campo deflector. Por otro lado, el peso total de los imanes los hace cada vez más costosos de construir y operar.

#### El sincrotrón

La propuesta del sincrotrón, un acelerador con una órbita fija y campos magnéticos deflectores ajustados a la velocidad de las partículas y los avances en electrónica, además del invento del enfocamiento fuerte, resolvieron las limitaciones del diseño original formulado en los años 1940 del concepto del sincrotrón. La primera ventaja de los sincrotrones es que los campos magnéticos no requieren ocupar una gran área sino sólo la del camino cíclico que recorrerá el haz, esto implica que sólo un volumen relativamente pequeño debe de ser puesto al alto vacío. Finalmente, los avances en control automatizado hicieron factible la construcción y operación del nuevo diseño.

Hoy, los laboratorios que se basan en el diseño del sincrotrón incluyen los dedicados a las altas energías tanto de hadrones (partículas con inter-

acción fuerte, entre ellos, protones y núcleos atómicos) como de electrones. Estos últimos, sin embargo, han tenido un efecto secundario como fuentes de luz que los ha hecho fundamentales para el estudio no tanto de los choques de partículas a altas energías sino en el desarrollo científico y tecnológico de un conjunto creciente de ciencias exactas y naturales, así como en estudios antropológicos, paleontológicos y de conservación del patrimonio cultural. Esta última categoría nació de una limitación que tienen todos los aceleradores cíclicos y que podemos entender de la fórmula de Larmor. En efecto, la radiación electromagnética emitida crece con el cuadrado de la aceleración por lo que dada una fuerza de confinamiento ejercida por un campo magnético, que está dada por la fuerza de Lorentz, es la misma para electrones que para protones con tan sólo invertir el sentido de la velocidad. Puesto que el electrón tiene una masa 1 835 veces menor que el protón su aceleración será  $1\ 835^2 \approx 3\ 370\ 000$  mayor por lo que su potencia radiada será correspondientemente mucho más grande. El resultado neto es que los aceleradores cíclicos tienen una limitación adicional, que dados un campo magnético deflector y una misma energía de diseño, aparece mucho antes en un acelerador de electrones que en uno de protones pues en cada ciclo los electrones emiten mucho más radiación de sincrotrón.

Para un haz de electrones en un circuito circular de unos cien metros de diámetro, con una energía de 3 GeV, la pérdida de energía por ciclo empieza a ser considerable y el pico de radiación está cerca de los rayos X. El consumo de energía hace imprácticos los sincrotrones de electrones para altas energías cuando su objetivo es usarlos directamente en choques con otras partículas. En cambio, si lo que buscamos es producir luz, los sincrotrones de electrones se convierten en instrumentos fundamentales. Hoy en día existen más de cincuenta sincrotrones de electrones en todo el mundo, en ellos se realizan decenas de experimentos en diversas áreas del conocimiento. Si se requiere acelerar electrones a mayores energías, la alternativa son los aceleradores lineales. El acelerador lineal de electrones que dominó la escena científica desde los años 1960 hasta inicios del siglo XXI fue el Stanford Linear Accelerator Center (SLAC) que alcanzó una energía 20 GeV, este acelerador se usa aún pero como fuente de electrones para un láser de electrones libres.

#### Colisión en la ciencia

Una de las formas en que los haces de partículas se usan en los experimentos es haciendo que choquen con un bloque de materia, estos experimentos eran la norma hasta los años 1960 y son los hoy llamados expe-

rimentos de blanco fijo. En 1962, Touchek propuso hacer chocar un haz de partículas contra otro de antipartículas. Así nació el concepto de anillos de colisión. El encanto de esta idea es que si queremos investigar la estructura de la materia a escalas de longitud más pequeñas tenemos que usar energías cada vez más grandes, como vimos antes. Es claro que un choque entre dos objetos es tanto más energético si los dos están en movimiento uno contra otro comparado a cuando uno está en reposo. La mayor parte de los experimentos hechos hoy en la física de altas energías se hace así. El sincrotrón LHC en CERN logra una energía efectiva (en el centro de masa) de 14 TeV haciendo chocar dos haces de protones de 7 TeV cada uno, para lograr un choque equivalente con un blanco fijo, necesitaríamos un haz diez mil veces más energético.

Rayos y centellas ¿el futuro?

Una de las limitantes más restrictivas para acelerar partículas es la producción de descargas eléctricas (chispas), esto es, la creación de un plasma. Si aumentamos la intensidad del campo eléctrico a decenas de MeV·m sacaremos chispas de los materiales adyacentes a ese campo eléctrico.

Sin embargo, en 1979 T. Tajima y J. M. Dawson de la UCLA propusieron que los plasmas en vez de ser una dificultad podrían usarse para producir enormes campos eléctricos. La idea es crear una burbuja moviéndose en el plasma a velocidad relativista. Esto produce una oquedad en el plasma e inyectando en ella un paquete de partículas, éste generará un descomunal campo eléctrico que acelerará el paquete de carga. La idea parecía al inicio una quimera pues se requiere no sólo controlar un plasma y producir el hueco adecuado en él, sino introducir o crear en el hueco un paquete de partículas cargadas. Treinta años después, hay un buen número de laboratorios que han logrado acelerar cargas con gradientes de campo de varios GeV·cm.

De resolverse los problemas de sacar el paquete de carga acelerado e introducirlo de nuevo en otro plasma se tendría una nueva revolución en la física de aceleradores. Las energías de los grandes laboratorios se podrían obtener en unos cuantos metros.

## CONCLUSIÓN

La ciencia de aceleradores ha avanzado notablemente a partir de la década de 1930, cada diez años la energía de los haces fue aumentando en un

factor de 33, esto fue observado por M. Stanley Livingston en 1954. Sólo en los últimos quince años el aumento se ha frenado.

Los grandes aceleradores son unas cuantas decenas, de ellos unos diez están orientados a física de partículas elementales y a la física nuclear, otras cincuenta de estas instalaciones son sincrotrones de electrones optimizados en la producción de luz. Estos números palidecen con las aplicaciones industriales y médicas de los aceleradores donde se cuentan por miles.

Un país como México tiene un gran trabajo por realizar para hacer suya esta forma de generar conocimiento y desarrollo científico-tecnológico. El país ha generado un cuerpo de científicos y tecnólogos capaces de usar los resultados de los aceleradores, desde científicos nucleares y de altas energías, física orientada a la medicina e inclusive el personal técnico y científico que opera aceleradores. El punto más débil en el desarrollo es en el diseño y la construcción de estos aparatos, no es que no haya habido intentos de generarlo pero la escala de los logros en la ciencia y tecnología de aceleradores no corresponde a las necesidades y mucho menos al potencial de este tipo de desarrollo.

Hoy en día existe una gran coyuntura en el campo de Fuentes de Luz de Sincrotrón pues el diseño de los aceleradores se hace básicamente a la medida y hay un concepto innovador que permitiría tener una infraestructura de primer nivel. Ésta modernizaría la manera en que se realizan los experimentos en decenas de campos científicos y tecnológicos y creando nuevas oportunidades en muchos otros. Sería una muy importante fuente de innovación así como de vinculación entre la academia y el sector productivo. Lejos de una limitación, este reto representa una gran oportunidad para nuestro país. De hecho se tiene una propuesta sólida desde el punto de vista técnico para desarrollarlo [1]. Ahora falta la visión política para apalancar el desarrollo económico y social del país usando al conocimiento científico tecnológico como base. Se argumenta que tal desarrollo de esta infraestructura es muy costoso, pero en realidad es mucho mayor el costo de no hacerlo.

#### AGRADECIMIENTOS

Agradezco a los Dres. Karen Volke y Jorge Flores la invitación a participar en este libro y a la Dra. Rosa María Méndez y al Ing. Fís. Rodolfo Leo por su lectura crítica, paciencia y esmero al corregir los errores de las primeras versiones del manuscrito. También quiero dar las gracias al M. en C. Édgar Sánchez por su ayuda para resolver dificultades técnicas con el

formateo en L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X de este trabajo.

#### Notas bibliográficas

La bibliografía que aparece a continuación está formada por tres libros y una liga a una de las escuelas de aceleradores de partículas: la First Mexican Particle Accelerator School, llevada a cabo en 2011 en Guanajuato, Gto., la escuela trató de muchos temas de actualidad las lecciones del Dr. Satogata [2] son muy apropiadas para el lector que quiera una introducción general en el uso de los conceptos apenas señalados en este capítulo. El excelente libro de Ne'eman y Kirsh [3] está centrado en la evolución de los descubrimientos en la física de partículas elementales, a pesar de esto describe en detalle y en mucha mayor amplitud los aceleradores aquí presentados. El libro de Edwards y Sypher [4] es para el lector que quiera un primer curso en las técnicas y conceptos de la física de aceleradores. El libro de Segrè [5] tiene un capítulo dedicado a los aceleradores hasta 1964, deja fuera los desarrollos más recientes pero es una referencia clásica, obligada y concisa a los conceptos centrales de los aceleradores de partículas. Finalmente, el libro de Moreno y Novaro [1] presenta algunos de los usos y logros de las fuentes de luz de sincrotrón y también analiza la conveniencia de instalar tal fuente de luz en México.

#### REFERENCIAS

- [1] M. Moreno y O. N. Peñalosa, *Grandes Proyectos Científicos. Sincrotrón*. El Colegio Nacional, 2017.
- [2] T. Satogata, *2011 Accelerator Physics Lectures*, 2011. dirección: <https://toddsatogata.net/2011-MePAS/> (visitado 15-03-2020).
- [3] Y. Ne'eman e Y. Kirsh, *The particle hunters*. Cambridge University Press, 1996.
- [4] D. A Edwards y M. J Syphers, *An introduction to the physics of high energy accelerators*. New York: Wiley, 1993.
- [5] E. G. Segrè, *Nuclei And Particles: AN Introduction To Nuclear And Sub-nuclear Physics*, 2 edition. New York: W. A. Benjamin, ene. de 1977.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙



## LA IMPORTANCIA DE LOS ANÁLOGOS CLÁSICOS EN LA RADIACIÓN CUÁNTICA

*Genaro Toledo Sánchez\**

La radiación electromagnética clásica se puede deducir de la estructura multipolar de la fuente. El análogo cuántico exhibe similitudes y diferencias, cuyo entendimiento nos permite explorar más propiedades de la naturaleza de la fuente. Nuevos fenómenos podrían ser descubiertos usando como herramienta los procesos radiativos. En este capítulo discutimos de manera general cómo la estructura multipolar clásica se convierte en el régimen cuántico en un punto de acceso a fenómenos no necesariamente electromagnéticos que, por ejemplo, en el escenario de las partículas elementales permitirían poner a prueba las simetrías internas del modelo estándar, entender mejor a la interacción fuerte en el régimen de bajas energías o identificar la presencia de nuevas partículas, entre otros.

Los fenómenos electromagnéticos han fascinado a la humanidad a lo largo de su historia. El entendimiento del origen común de los fenómenos eléctricos y magnéticos es la base de nuestra actual era tecnológica. La electrónica y su identificación con la dinámica de los electrones son conceptos que permean ya a nuestra sociedad. Podríamos citar, como ejemplos, propiedades tales como las leyes de atracción y repulsión entre cargas eléctricas o la conservación de la carga eléctrica. En un nivel más académico, la teoría electromagnética clásica es parte de la formación de un estudiante de licenciatura en ciencias o ingeniería [1]. La formulación cuántica es parte de la formación de un estudiante de ciencias [2]. Este entendimiento de los fenómenos electromagnéticos y su correspondiente verificación a nivel experimental, es la puerta para la exploración de nuevos fenómenos y diseño de nuevas aplicaciones tecnológicas. Por ejemplo, en la observación

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

de la radiación cósmica proveniente del Universo temprano se combinan tanto el entendimiento del Universo como un sofisticado desarrollo de detectores. La manipulación de átomos y nano-partículas utilizando campos electromagnéticos, incluso a temperaturas de unos cuantos nano-Kelvins, ofrece escenarios para probar las propiedades cuánticas de estos objetos. En el puro régimen cuántico, las propiedades electromagnéticas de las partículas más fundamentales identificadas hasta ahora, son escenarios ideales para probar a muy alta precisión el entendimiento de nuestro Universo. Por ejemplo, la observación de la radiación emitida por la partícula  $W$ , mediadora de la interacción débil, permite probar las simetrías inherentes del llamado modelo estándar de las partículas elementales (MS) [2]. Observaciones recientes de la radiación del muón (un gemelo del electrón pero con aproximadamente 200 veces su masa) pareciera indicar la presencia de fenómenos cuánticos no descritos por el MS [3]. Lo anterior, ilustra la importancia de entender las analogías y diferencias entre el régimen clásico y cuántico de procesos radiativos. En este capítulo describiremos algunos de los conceptos y herramientas básicas que nos permitan entender cómo se abordan estos fenómenos, y daremos una idea de la gama de posibilidades que esto ofrece para seguir explorando la naturaleza.

#### DE PROPIEDADES ESTÁTICAS A LA RADIACIÓN MULTIPOLAR

Comencemos por dar una descripción genérica de un conjunto de partículas cargadas en reposo a las que les podemos asociar una densidad, en la región del espacio en la que están ubicadas. Esta densidad de carga ( $\rho(\vec{x}')$ ) tiene asociada un potencial ( $\Phi$ ), que corresponde al trabajo realizado para llevar a las cargas desde una distancia infinitamente lejana a la configuración actual en presencia del campo electrostático asociado. El área de estudio llamada electrostática tiene como objetivo determinar este potencial en cualquier punto del espacio ( $\vec{x}$ ) para diversas formas de la densidad de carga. Esto puede ser un verdadero reto, dependiendo de lo compleja que sea la distribución de carga. Sin embargo, intuitivamente, uno puede darse cuenta que entre más alejado esté el punto de observación de la distribución de carga, la distancia relativa entre las partículas cargadas se vuelve menos relevante comparada con la distancia entre la zona de densidad de carga y el punto de observación. Así, fuera de la distribución de carga, el potencial producido en un punto del espacio por las cargas localizadas en una región

$d\vec{x}'$  está descrito como:

$$\Phi(\vec{x}) = \int \frac{\rho(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3x' = \frac{1}{2l+1} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l q_{lm} \frac{Y_{lm}(\theta, \phi)}{r^{l+1}}. \quad (43.1)$$

En la segunda igualdad se ha escrito en términos de armónicos esféricos, considerando coordenadas esféricas ( $r = |\vec{x} - \vec{x}'|$ ,  $\theta$  y  $\phi$ ). Este es el llamado desarrollo multipolar, el cual define a los coeficientes  $q_{lm}$  para los valores enteros de  $l$ , desde  $l = 0$  que denominamos monopolos,  $l = 1$  como dipolos, etc. Un punto importante a recordar es que estos coeficientes están definidos en el caso estático. La pregunta que surge naturalmente, es: ¿qué pasa cuando tal densidad de carga es acelerada? Por supuesto, la respuesta inmediata es que se emitirá radiación. La siguiente pregunta es: ¿la radiación conserva su caracterización asociada a los momentos multipolares? la respuesta es afirmativa si consideramos que la densidad de carga no sufre deformaciones. Así, podemos caracterizar la radiación emitida por monopolos (cargas), dipolos, cuadrupolos, etc. Mas aún, dada las propiedades de ortogonalidad de los armónicos esféricos, se puede identificar que los multipolos son linealmente independientes y la interferencia de sus radiaciones es nula. Este punto lo desarrollaremos más adelante para mostrar su análogo cuántico. Hemos saltado a las observaciones fenomenológicas asociadas a la descripción utilizando sólo la estructura del potencial electrostático. Sin embargo, el elemento importante a considerar en la radiación es el llamado potencial vector, denotado por  $\vec{A}(\vec{x})$ , asociado a la corriente producida por el movimiento acelerado de las cargas.

#### RADIACIÓN DE BAJAS ENERGÍAS

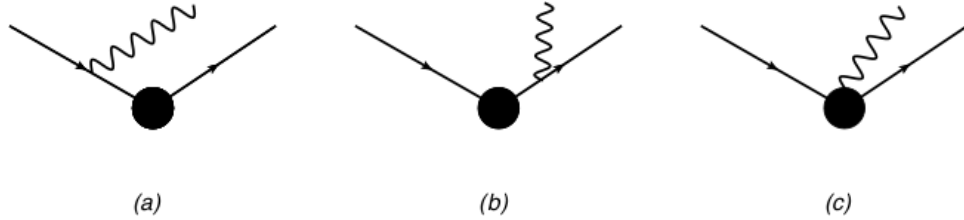
La radiación clásica corresponde a radiación de bajas energías, también denominada de baja frecuencia ( $\omega$ ). En el lenguaje cuántico, esto se denomina la descripción de fotones suaves. Si consideramos que una partícula de carga  $ze$  colisiona con un blanco, el proceso dispersivo produce un cambio de momento lineal (también denominado ímpetu o cantidad de movimiento) en la partícula emitiendo radiación ( $\vec{p} \rightarrow \vec{p}'$ ). Un procedimiento práctico para llevar el espectro de la radiación producida a una forma que sea comparable con la versión cuántica corresponde a discretizarla, convirtiéndola en un espectro de fotones de energía  $\hbar\omega$  (momento lineal  $\vec{k}$ ) la cual es directamente proporcional a la sección eficaz de dispersión. Más allá de los detalles técnicos, el espectro en el límite de bajas frecuencias tiene la siguiente

estructura:

$$\lim_{\hbar\omega \rightarrow 0} \frac{d^3N}{(d^3k/k_0)} \propto z^2 e^2 \left( \frac{\epsilon \cdot p'}{k \cdot p'} - \frac{\epsilon \cdot p}{k \cdot p} \right)^2, \quad (43.2)$$

en donde se le ha escrito de manera invariante de Lorentz utilizando el producto escalar, con los momentos lineales ( $\vec{p}$ ,  $\vec{p}'$  y  $\vec{k}$ ) y polarización ( $\vec{\epsilon}$ ) generalizados a cuadri-vectores ( $p^\mu$ ,  $p'^\mu$  y  $k^\mu$ , con  $k_0$  la componente cero de  $k^\mu$ ) y cuadri-polarización ( $\epsilon^\mu$ ), de aquí en adelante por simplicidad denominados como momentos y polarizaciones respectivamente y omitiendo su índice de Lorentz cuando no sean relevantes para la discusión. Observemos que la estructura entre paréntesis depende de manera inversa respecto al momento del fotón ( $\propto 1/k$ ), esta es típica de la radiación por cargas.

En la descripción cuántica, la amplitud de probabilidad de transición de un proceso que emite radiación se puede escribir considerando la suma coherente de las amplitudes de probabilidad de emisión del fotón de momento  $k$  y polarización  $\epsilon$  por cada una de las partículas cargadas involucradas en el proceso, más la probabilidad de que sea emitida de la parte interna del proceso de transición, como se muestra en la figura 43.1. Siguiendo las reglas de Feynman para la electrodinámica cuántica se puede mostrar que, en la aproximación de fotones suaves, la función al cuadrado en la ecuación (43.2) es proporcional a la amplitud de probabilidad cuántica.



**Figura 43.1:** Descripción gráfica de la emisión de la radiación por partículas cargadas iniciales y finales (a y b) y procesos internos (c).

#### ESTRUCTURA MULTIPOLAR DE LA RADIACIÓN CUÁNTICA

El elemento de matriz de una transición electromagnética se describe a través de la cuadri-corriente electromagnética  $J^\mu \equiv (\rho^{EM}(\vec{x}), \vec{J}^{EM}(\vec{x}))$  como:

$$\langle f | H_{EM} | i \rangle \equiv J^\mu \epsilon_\mu, \quad (43.3)$$

en donde  $i$  y  $f$  son los estados iniciales y finales respectivamente y  $H_{EM}$  es el Hamiltoniano de interacción electromagnética. La corriente se puede

escribir de forma general explotando su estructura de Lorentz con coeficientes que dependen del momento transferido durante el proceso. Estos coeficientes, también llamados factores de forma, contienen la información de la estructura multipolar. Para poder identificar dicha estructura, los multipolos clásicos se promueven a nivel de operadores, definiendo las probabilidades de transición de forma tal que, en el límite estático (transferencia de momento cero), se recupera la estructura correspondiente clásica. Como ejemplos, la carga eléctrica, momento dipolar eléctrico, cuadrupolo eléctrico y momento dipolar magnético, están definidas, respectivamente, como:

$$Q = \int d^3x \rho^{EM}(\vec{x}), \quad (43.4)$$

$$\vec{D}_E = \int d^3x \vec{x} \rho^{EM}(\vec{x}), \quad (43.5)$$

$$X_E^{ij} = \int d^3x x^i x^j \rho^{EM}(\vec{x}), \quad (43.6)$$

$$\vec{D}_M = \frac{1}{2} \int d^3x \vec{x} \times \vec{J}^{EM}(\vec{x}), \quad (43.7)$$

en donde  $\rho^{EM}(\vec{x})$  es la componente cero de la cuadri-corriente electromagnética. Así, la evaluación de los valores esperados de estos operadores, para la transición dada, revela la estructura multipolar y su relación con los factores de forma de la densidad de carga en el régimen estático.

Una vez que se ha identificado la estructura multipolar de la radiación podemos, de manera general, describir la amplitud de probabilidad de radiación como una serie en potencias del momento del fotón como:

$$\mathcal{M}(i \rightarrow f + \gamma) = \frac{\alpha_{-1}}{k} + \alpha_0 k^0 + \alpha_1 k + \alpha_2 k^2 + \dots, \quad (43.8)$$

en donde el primer término, como hemos ilustrado anteriormente, corresponde a la radiación por carga eléctrica (en el espectro de fotones que obtuvimos anteriormente se tiene la amplitud al cuadrado, la cual es de la forma  $1/k^2$ ), el segundo término se identifica con la radiación dipolar magnética, la siguiente con la cuadrupolar, etc. En este punto nos podemos preguntar si el comportamiento cuántico de la radiación, en términos de multipolos, es similar al clásico. Como ya mencionamos, la radiación por carga es similar en el caso de fotones suaves y los operadores multipolares cuánticos permiten identificar a los multipolos en el límite electrostático. Una observación realizada por F. E. Low [4] (Teorema de Low), mostró que la amplitud de

probabilidad radiativa se puede describir completamente en términos del proceso no-radiativo, si se consideran los dos primeros términos en el desarrollo. Es decir, la información que puede ser extraída es la que ya se conocía sin radiar. En este sentido se dice que es independiente del modelo utilizado para describir el proceso radiativo, conocido el no radiativo. Los multipolos superiores, por su parte, requieren de información adicional que puede ser introducida vía algún modelo asociado a la descripción del objeto radiante más allá de la carga, que denominamos de manera genérica como internos.

#### DE LA CONSERVACIÓN DE LA CARGA ELÉCTRICA A EFECTOS INTERNOS

Algo que no hemos acentuado y que rige a los procesos electromagnéticos es la conservación de la carga. En la versión clásica, la identificamos generalmente con la ecuación de continuidad. Su versión cuántica pasa por la propiedad de simetría de norma global la cual, en acuerdo con el teorema de Noether, nos dice que si las ecuaciones de movimiento son invariantes bajo una transformación de norma global existe una corriente conservada y una carga conservada. La llamada electrodinámica cuántica (QED) se basa justamente en este hecho y su generalización a una transformación de norma local. La transformación de norma electromagnética genérica  $A^\mu \rightarrow A^\mu + \partial^\mu \alpha$  corresponde a  $\epsilon^\mu \rightarrow \epsilon^\mu + k^\mu$  en el espacio de momentos. Si escribimos la amplitud de probabilidad factorizando la polarización ( $\mathcal{M} = \mathcal{M}_\mu \epsilon^\mu$ ), entonces la invariancia de norma requiere que  $\mathcal{M}_\mu \epsilon^\mu = \mathcal{M}_\mu (\epsilon^\mu + k^\mu)$  entonces  $\mathcal{M}_\mu k^\mu = 0$ . Podemos verificar que la amplitud de radiación de carga, ecuación (43.2), satisface esta condición observando que ésta es nula reemplazando  $\epsilon \rightarrow k$ . Esto nos indica que la radiación de ordenes mayores tiene que ser invariante de norma orden por orden, para poder satisfacer esta condición. Sin embargo, dado que sólo la carga eléctrica se conserva, los coeficientes que acompañan a estos términos no están fijos a priori por la simetría de norma de QED. Esto es, se requiere de un modelo que describa al objeto que radía, más allá de la carga, para saber el valor de estos coeficientes. Esta característica permite probar modelos que intenten explicar las observaciones experimentales sensibles a esos parámetros.

Una observación importante en el caso de la amplitud de Low es que se ha mostrado que la interferencia entre la radiación de carga y la radiación dipolar magnética se anula, en analogía con el comportamiento clásico para partículas a las que no se les identifica una estructura interna [4, 5]. Más allá de éstas, de manera general no parece haber un comportamiento similar

en las interferencias entre otros multipolos, ya que son dependientes de modelo y la invariancia de norma no es suficiente para fijar la forma de los procesos internos.

#### PERSPECTIVAS

La cantidad de preguntas que la descripción de procesos electromagnéticos nos puede ayudar a responder es muy amplia. Permítanos citar algunos ejemplos relacionados con la estructura multipolar de las partículas más fundamentales: i) La estructura de norma del MS fija de manera única la forma y magnitud del acoplamiento del bosón  $W$  con el fotón [2], es decir predice el valor del momento dipolar magnético y el cuadrupolar del  $W$ . La verificación experimental de dicha predicción para sus multipolos [3], por una parte confirma la estructura de norma del MS al nivel de precisión actual, y por otra, establece que la observación de desviaciones a ella significaría evidencia de nueva física, de manera ineludible. ii) El momento dipolar magnético del muón es una de las cantidades mejor medidas en la física (el error experimental es del orden de  $10^{-10}$ ) [3]. Esto, aunado a su masa relativamente grande, le permite ser sensible a correcciones cuánticas por procesos internos asociados a las interacciones electromagnéticas, débiles y fuertes. Actualmente, existe una discrepancia de más de 3 desviaciones estándar con la predicción teórica basada en el MS [3]. Experimentos en Japón y Estados Unidos medirán en los próximos años esta propiedad con una precisión mayor. Esto muestra la capacidad de detectar nueva física en procesos asociados a la observación de una propiedad electromagnética. iii) El mesón  $\rho$  es un estado de espín uno compuesto de pares quark-antiquark ligados por la interacción fuertemente. A la energía en que esto ocurre (tomemos por referencia  $770 \text{ MeV}/c^2$ , la masa del mesón  $\rho$ ) la interacción fuerte es muy intensa y no puede ser tratada perturbativamente para calcular cómo está distribuida la densidad de carga y por consiguiente el valor de los multipolos, por lo que medir sus propiedades multipolares abre la puerta para entender a la interacción fuerte en éste régimen. Experimentos en los que un fotón interactúa con estos estados podrían, por primera vez, determinar un valor para el momento dipolar magnético de una partícula de este tipo.

Hemos mostrado, de manera breve, que la descripción electromagnética clásica y su extensión cuántica, reflejan propiedades similares a cierto nivel y que surgen diferencias a energías sensibles a multipolos más allá de la carga y momentos dipolares. Así, el entendimiento de las propiedades de

la radiación permiten explorar las propiedades electromagnéticas de procesos cuánticos y efectos de estructura interna no conocidos. Hemos tratado de acentuar el nivel de importancia citando algunos ejemplos, pero sin duda, existe un vasto panorama de posibilidades en la que el entendimiento de las versiones clásicas y cuánticas, y sus correspondientes analogías, nos permitirán extender nuestro actual conocimiento de la naturaleza.

#### GLOSARIO

- **MeV** Unidad de energía que equivale a  $1.602 \times 10^{-13}$  Joules.

#### ACRÓNIMOS

- **MS:** Modelo Estándar de las partículas elementales.

#### REFERENCIAS

- [1] J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, Third Edition. New York: John Wiley & Sons, 1999.
- [2] M. E. Peskin y D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, en. Avalon Publishing, oct. de 1995.
- [3] C. Patrignani, Particle Data Group, K. Agashe y col., «Review of Particle Physics», *Chinese Physics C*, vol. 40, n.º 10, pág. 100 001, oct. de 2016.
- [4] F. E. Low, «Bremsstrahlung of Very Low-Energy Quanta in Elementary Particle Collisions», *Physical Review*, vol. 110, n.º 4, págs. 974-977, mayo de 1958.
- [5] T. H. Burnett y N. M. Kroll, «Extension of the Low Soft-Photon Theorem», *Physical Review Letters*, vol. 20, n.º 2, págs. 86-88, ene. de 1968.



## GRAFENO: EFECTOS CUASI-RELATIVISTAS EN LA PUNTA DE UN LÁPIZ

*Manuel Torres\**

**El grafeno es una estructura bidimensional formada por una monocapa de átomos de carbón, la cual presenta una serie de sorprendentes propiedades físicas que prometen dar lugar a importantes desarrollos tecnológicos. Por otro lado, la electrodinámica cuántica (QED, por las siglas en inglés de quantum electrodynamics) al combinar la relatividad con la mecánica cuántica es la teoría que describe las interacciones electromagnéticas de las partículas elementales. En este capítulo explicamos por qué el grafeno presenta fenómenos análogos a los descritos por la QED. Este hecho, ha permitido poner a prueba algunos fenómenos predichos por la QED, que a la fecha no habían sido verificados experimentalmente.**

El carbono es un elemento esencial para la conformación de los organismos vivos. La versatilidad de sus enlaces electrónicos le permite aparecer en diversas formas alotrópicas, por ejemplo el diamante caracterizado por su dureza y transparencia o el grafito que se utiliza en la punta de los lápices. Otras estructuras de carbono, descubiertas en las últimas décadas son: los fullerenos donde los átomos de carbono están arreglados en esferas huecas que se asemejan a un balón de fútbol; los nanotubos de carbono que son estructuras cilíndricas y finalmente el grafeno que, aunque presente en las capas del grafito, fue apenas descubierto en el año 2004, mostrando con ello que una sola capa de átomos de carbono puede ser separada y permanecer como una estructura estable. Como resultado de este descubrimiento A. Geim y K. Novoselov obtuvieron el premio Nobel de física en 2010.

El grafeno es el primer ejemplo conocido de un cristal realmente bidimensional, donde los átomos de carbono se localizan en una estructura

---

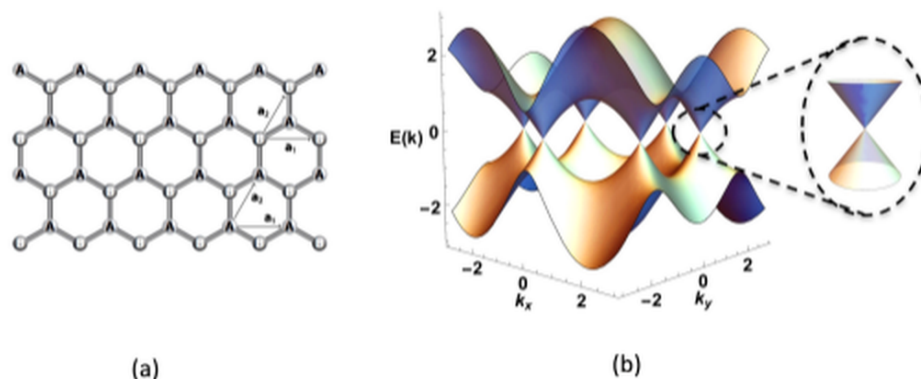
\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

hexagonal, tipo panal de abeja. El grafeno se distingue por sus excepcionales propiedades mecánicas, ópticas, eléctricas y térmicas. Propiedades que lo hacen un material muy versátil, las cuales se relacionan con las múltiples posibilidades de aplicaciones prácticas que vislumbran para este material, lo cual ha llevado a especular que podría dar lugar a una nueva revolución en la electrónica.

El grafeno se caracteriza por su excelente conductividad, que es incluso miles de veces mayor que la conductividad del cobre. Destaca también por su elasticidad y resistencia mecánica, siendo mucho más resistente que el acero. Pero al mismo tiempo, es muy maleable, ya que debido a su estructura de monocapa puede doblarse y desdoblarse fácilmente. En relación a las propiedades ópticas, el grafeno es un material muy transparente, absorbe sólo el 2.3% de la luz incidente. Siendo notable el hecho de que el coeficiente de absorción del grafeno  $\eta$ , se determina completamente en términos de la constante de estructura fina:  $\eta = \pi e^2 / \hbar c \approx 2.3\%$ .

#### ELECTRONES CUASI-RELATIVISTAS EN GRAFENO

Uno de los aspectos más atractivos del grafeno es que la dinámica de los portadores de carga a bajas energías se describe por una ecuación bidimensional de Dirac. Lo cual da como resultado que el grafeno presente fenómenos análogos a los de la QED.



**Figura 44.1:** (a) Se muestra la red hexagonal del grafeno, la cual está formada por dos subredes triangulares de Bravais; señaladas por las letras *A* y *B* respectivamente. (b) Estructura de bandas  $E(\mathbf{k})$  para el grafeno. Se muestra una ampliación del espectro de energía  $E(\mathbf{k})$  cerca de un punto de Dirac, el cual corresponde a un “cono de Dirac”, es decir a una relación de dispersión lineal  $E = \pm v_F \hbar |\mathbf{k}|$ .

En el grafeno los átomos de carbono se agrupan en una estructura como la mostrada en la figura 44.1a. Un elemento esencial de esta estructura es que está formada por dos subredes triangulares, denotadas por redes  $A$  y  $B$ . Cada una de ellas es una red de Bravais, en el sentido de que a partir de un punto dado de una subred, se puede llegar a cualquier otro punto de la misma red por medio del vector  $m \mathbf{a}_1 + n \mathbf{a}_2$ , donde  $m$  y  $n$  son números enteros y  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$  son dos vectores base de la red triangular.

La dinámica de los portadores de carga en grafeno se analiza de acuerdo al formalismo de amarre fuerte, en el cual las transiciones electrónicas sólo se dan entre átomos vecinos. Como se observa de la figura 44.1a, para cada átomo de la red  $A$ , los vecinos más cercanos pertenecen a la red  $B$ , y viceversa. La estructura de bandas para este sistema se conoce a partir del trabajo de P. R. Wallace desde 1947 y se muestra en la figura 44.1 b. El espectro de energía,  $E(\mathbf{k})$ , como función del ímpetu  $\mathbf{k}$  es simétrico respecto al valor de energía cero  $E(\mathbf{k}) = 0$ . Lo más notable es que, a diferencia del usual comportamiento parabólico, el espectro es lineal cerca del punto donde los niveles de energía positiva y negativa se tocan, dando lugar a los llamados conos de Dirac. Formalmente la dinámica de los portadores de carga se describe por una ecuación bidimensional de Dirac

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi, \quad \psi = \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix}, \quad (44.1)$$

donde  $\hbar$  es la constante de Planck,  $\nabla = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right)$  y la velocidad  $v_F$  se calcula en términos de los parámetros de la red del grafeno como  $v_F \approx 1 \times 10^6$  m/s. En la ecuación anterior  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  son las matrices de Pauli que actúan sobre el espinor  $\psi$  cuyas componentes  $\phi_A$  y  $\phi_B$  representan la amplitud correspondiente a un electrón que se localiza en la red  $A$  o  $B$  respectivamente. A diferencia de la QED, en el caso del grafeno los eigenvalores de las matrices  $\boldsymbol{\sigma}$  no se asocian al espín de la partícula, sino a la localización de la partícula sobre la red  $A$  o  $B$ , por lo cual al grado de libertad asociado se le conoce como cuasi-espín. De acuerdo a lo anterior, si la partícula se encuentra localizada en la red  $A$ , el espinor correspondiente estará dado por  $\psi_A = (1, 0)^T$ , cumpliendo con la ecuación de eigenvalores  $\sigma_z \psi_A = +\psi_A$ . Mientras que si se encuentra localizada en la red  $B$ , tendremos  $\psi_B = (0, 1)^T$  y la proyección del cuasi-espín será  $\sigma_z \psi_B = -\psi_B$ .

Para un portador de carga que se propaga en la red con ímpetu  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ , la solución estacionaria  $\psi_{\pm}(\mathbf{k})$  a la ecuación (44.1) da lugar a la relación de dispersión lineal  $E = \pm v_F \hbar |\mathbf{k}|$ , característica de una partícula relativista de

energía  $E$  y masa nula, que se propaga con una velocidad constante  $v_F$ . En consideración al valor observado para la velocidad  $v_F$ , podríamos decir que en el grafeno los electrones se rigen por un formalismo relativista “lento”, ya que  $v_F \approx c/300$ , donde  $c$  es la velocidad de la luz.

Los estados  $\psi_+(\mathbf{k})$  de energía positiva  $E = v_F \hbar |\mathbf{k}|$  son identificados con portadores tipo electrón y por lo tanto de carga negativa. Mientras que para los estados  $\psi_-(\mathbf{k})$  de energía negativa  $E = -v_F \hbar |\mathbf{k}|$ , los estados electrónicos desocupados (huecos) se comportan como cuasipartículas cargadas positivamente. Debido a que  $\psi_+(\mathbf{k})$  y  $\psi_-(\mathbf{k})$  son soluciones de la misma ecuación de Dirac, electrones y huecos están interconectados mutuamente a través de una simetría de conjugación de carga, es decir se comportan como anti-partículas uno del otro.

Lo anterior permite introducir el concepto de helicidad para el caso del grafeno. En la QED la helicidad se refiere a la proyección del espín en la dirección del ímpetu  $\mathbf{k}$ . De manera análoga en el grafeno se define la helicidad  $\hat{h}$  como la proyección del cuasi-espín en la dirección de  $\mathbf{k}$ , por lo que el operador de helicidad  $\hat{h}$  y su efecto sobre las eigenfunciones  $\psi_{\pm}(\mathbf{k})$  del Hamiltoniano de Dirac están dadas como:

$$\hat{h} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}, \quad \hat{h} \psi_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \frac{1}{2} \psi_{\pm}(\mathbf{k}). \quad (44.2)$$

Lo que muestra que para el grafeno los electrones tienen helicidad positiva, mientras que los huecos tienen helicidad negativa. Esta situación es análoga a lo que sucede con los neutrinos que son partículas de helicidad negativa, mientras que los anti-neutrinos tienen helicidad positiva. La helicidad es una cantidad conservada debido a que el operador  $\hat{h}$  conmuta con el Hamiltoniano de Dirac en la ecuación (44.1).

## EFECTO CUÁNTICO DE HALL

La comprobación experimental del efecto Hall cuántico anómalo es una de las corroboraciones más contundentes de los efectos cuasi-relativistas en el grafeno. Los electrones confinados a moverse en un plano y sujetos a un campo magnético perpendicular describen órbitas circulares. En el ámbito cuántico dichas órbitas están cuantizadas y el espectro de energías es discreto, dando lugar a los niveles de Landau. Cada nivel tiene una gran degeneración, es decir existe un número importante de estados que difieren en un número cuántico, pero que coinciden en energía, ya que los centros de las órbitas pueden ocupar cualquier lugar del plano. En el caso no

relativista la energía de los niveles de Landau está dada por la expresión  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c$  con la frecuencia de ciclotrón dada por  $\omega_c = eB/m_e$  y donde  $B$  es la intensidad del campo magnético,  $e$  y  $m_e$  son la carga y masa del electrón respectivamente, y  $n$  es un número entero positivo. Los elementos anteriores resultan esenciales para entender el efecto cuántico de Hall. Por ejemplo, el efecto cuántico de Hall entero se relaciona con el llenado completo de cada uno de los niveles de Landau, dando lugar a la cuantización de la conductividad de Hall de acuerdo a la fórmula  $\sigma_{xy} = (e^2/h)N$ , donde  $N$  es el máximo nivel de Landau que se ocupa completamente. Lo anterior se manifiesta por la aparición de mesetas en la conductividad transversal, que aparecen al variar la densidad de electrones, o la intensidad del campo magnético (ver [Capítulo 22](#)).

En el caso relativista y para portadores de carga de masa nula el espectro de los niveles de Landau está dado por la fórmula

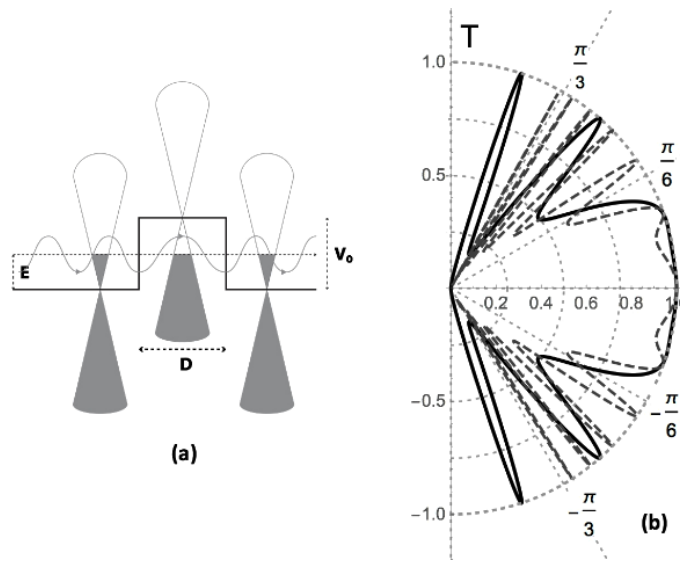
$$E_n = \pm \sqrt{2|e|B\hbar v_F^2 (n + 1/2 \pm 1/2)}, \quad (44.3)$$

donde el número cuántico  $n$  toma nuevamente los valores  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , pero ahora los niveles dependen también de la helicidad a través del factor  $\pm 1/2$ . Mientras que el espectro de energía no-relativista tiene una dependencia lineal respecto al campo magnético y el número cuántico  $n$ ; vemos que en el caso relativista el espectro tiene una dependencia  $E_n \propto \sqrt{B}$ , para todos los niveles, excepto para el nivel de energía cero, que se obtiene cuando  $n = 0$  y la helicidad es  $-1/2$  y el cual claramente es independiente de la intensidad del campo magnético.

La existencia de un nivel de energía nula y la dependencia  $\sqrt{B}$  del espectro de energía son señales distintivas de la dinámica relativista y han sido observados experimentalmente en el caso del grafeno. Adicionalmente, se ha corroborado la existencia del efecto Hall cuántico anómalo, en el cual la cuantización de la conductividad toma la forma  $\sigma_{xy} = 4(e^2/h)(N + 1/2)$ , donde  $N$  es el máximo nivel de Landau que se ocupa completamente. El corrimiento por un factor  $1/2$  respecto a la cuantización entera de la conductividad observada en el caso no relativista, se debe precisamente a la existencia del nivel de energía cero, y está relacionado con el hecho de que la degeneración de dicho estado es exactamente la mitad de la de todos los otros estados, propiedades que están relacionadas con las helicidades asociadas a dichos estados.

## TUNELAJE DE KLEIN

De acuerdo a la mecánica clásica una partícula de energía  $E$  que incide sobre una barrera de potencial de intensidad  $V_0$  es rebotada cuando se cumple la condición  $E < V_0$ . Sin embargo, en el caso cuántico una barrera de ancho finito  $D$  es en general permeable, ya que debido al comportamiento ondulatorio, existe una probabilidad diferente de cero, determinada por el coeficiente de transmisión  $T$ , de que la partícula penetre a través de la barrera de potencial. Dicha probabilidad de tunelaje decae exponencialmente conforme  $V_0$  y  $D$  se incrementan.



**Figura 44.2:** (a) Partícula de energía  $E$  incidiendo sobre una barrera de potencial, caracterizada por una anchura  $D$  y una intensidad  $V_0$ ;  $E < V_0$ . Las regiones oscuras de los conos de Dirac representan los estados de energía ocupados. Observamos que para el máximo estado de energía ocupado, seleccionado como  $E$ , en la región interior de la barrera de potencial existen estados de energía negativa que se alinean con los estados de energía positiva de la partícula incidente. (b) Distribución angular de la probabilidad de transmisión ( $T$ ) como función del ángulo de incidencia  $\phi$ . Los resultados dependen de dos parámetros adimensionales:  $\epsilon = E/V_0$  y  $\delta = V_0 D / 2\pi \hbar v_F$ . Los dos casos mostrados corresponden a:  $\epsilon = 0.53, \delta = 0.79$  (línea continua) y  $\epsilon = 0.48, \delta = 4$  (línea discontinua). Para incidencia normal  $\phi = 0$ , observamos el tunelaje de Klein ( $T = 1$ ), independientemente del valor de los parámetros. Para otros ángulos de incidencia se puede obtener  $T = 1$  como resultado de una interferencia constructiva, pero el valor de dichos ángulos dependen de los parámetros utilizados.

Un hecho sorprendente surge en el caso de la QED, ya que al aumentar la intensidad del potencial  $V_0$ , excediendo el doble de la energía en reposo del electrón, es decir  $V_0 > 2m_e c^2$ , el tunelaje aumenta y eventualmente la barrera de potencial se vuelve completamente transparente ( $T = 1$ ). Este efecto, aparentemente contradictorio, se conoció inicialmente como la paradoja de Klein. El origen físico se puede entender si consideramos que aún cuando la barrera es repulsiva para los electrones, atrae a los positrones dando lugar a estados de energía permitidos para los positrones dentro de la barrera que se alinean con la energía del continuo de los electrones fuera de la barrera, ver figura 44.2a. Este apareamiento de las funciones de onda de electrones y positrones en la frontera da lugar al incremento de la probabilidad de tunelaje a través de la barrera. Toda vez que el resultado encuentra una explicación dentro del formalismo de la QED, hoy en día se conoce como tunelaje de Klein.

Aun cuando posible en principio, la observación del tunelaje de Klein representa una enorme dificultad tecnológica y hasta ahora no había sido verificado experimentalmente. Para ello se requieren campos eléctricos que produzcan una caída de potencial mayor a  $2m_e c^2$  en una distancia del orden de la longitud de Compton del electrón  $\hbar/m_e c$ , lo que da una estimación de campos eléctricos enormes:  $\mathcal{E} > \mathcal{E}_c = 2m_e^2 c^3 / e \hbar \sim 10^{16} \text{ V/cm}$ , que no es posible producir hoy en día en el laboratorio.

Sin embargo, en el grafeno la masa efectiva de los portadores de carga es nula, y su dinámica es descrita por la ecuación de Dirac, por lo que podemos esperar que el tunelaje de Klein se manifieste claramente. Consideremos una barrera electrostática unidimensional en la dirección  $x$ , figura 44.2a. Formalmente el efecto de un potencial electrostático  $V(x)$  se incorpora, introduciendo en la ecuación (44.1) un término  $V(x) \mathbf{I}$ , donde  $\mathbf{I}$  es la matriz unidad. En la figura 44.2b se muestra la dependencia angular del coeficiente de transmisión cuando una partícula incide con un ángulo  $\phi$  respecto a la normal a la pared de la barrera. Observamos que para el caso de incidencia normal,  $\phi = 0$ , la barrera es completamente transparente, ya que el coeficiente de transmisión toma el valor  $T = 1$ . Este es el tunelaje de Klein y se puede explicar en términos de la conservación de la helicidad en grafeno. Tal y como comentamos anteriormente los electrones tienen helicidad positiva. Por lo que en el caso de incidencia normal, una reflexión de electrones por la barrera requeriría un cambio simultáneo del ímpetu  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$  y de la helicidad  $+1/2 \rightarrow -1/2$ . Pero esta inversión del cuasi-espín de la partícula no puede ser producida por la barrera de potencial, ya que al ser proporcional a la matriz unidad no puede invertir la dirección de la

helicidad. Por lo tanto no puede haber partículas reflejadas, dando lugar a una transmisión perfecta,  $T = 1$ .

En la figura 44.2b observamos que, además del ángulo  $\phi = 0$ , existen otros ángulos de incidencia para los cuales la barrera se vuelve transparente ( $T = 1$ ). Se debe a una interferencia constructiva, cuando se cumple la siguiente condición de resonancia  $k_x D = n\pi$ , donde  $n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$  y  $k_x$  es la componente  $x$  del ímpetu de las partículas dentro de la barrera. Es decir un número  $(n/2)$  de longitudes de onda  $(2\pi/k_x)$  caben exactamente en el ancho ( $D$ ) de la región de potencial.

La transmisión perfecta para partículas que inciden perpendicularmente a la barrera de potencial, se obtiene independientemente de la energía incidente y de la intensidad y anchura de la barrera de potencial, y son por lo tanto una clara manifestación del tunelaje de Klein. Lo cual ha sido corroborado experimentalmente. Este hecho tiene importantes consecuencias en las propiedades de transporte en el grafeno, ya que se relaciona con la gran movilidad que presentan los portadores de carga y la imposibilidad de confinarlos por medio de potenciales electrostáticos.

#### OTROS FENÓMENOS CUASI-RELATIVISTAS DEL GRAFENO

Existe un número importante de ejemplos adicionales de efectos cuasi-relativistas asociados al grafeno. Mencionamos sólo algunos, invitando al lector interesado a explorar los detalles y explicaciones en la literatura. (1) La observación de una conductividad mínima del orden  $e^2/h$  y su relación con el efecto de Zitterbewegung. (2) El efecto Schwinger relacionado con la producción de pares de partículas y anti-partículas por un campo eléctrico intenso. (3) El uso de la transformación de Lorentz en el estudio del transporte de partículas en presencia de campos eléctricos y magnéticos intensos. (4) La generación de campos electromagnéticos artificiales, producidos por deformaciones de la red del grafeno. (5) La utilización de la llamada mecánica cuántica supersimétrica para analizar la dinámica del grafeno. (6) El estudio del grafeno deformado utilizando formalismos de espacios curvos, similares a los de la relatividad general.

Es importante señalar que la descripción del grafeno por medio de la ecuación de Dirac es aproximada. Por lo que, su utilización para estudiar un sistema específico compuesto de grafeno o la predicción de posibles fenómenos cuasi-relativistas, requiere verificar en cada caso la validez de una descripción basada en la ecuación de Dirac. Sin embargo, en general dicha descripción ha mostrado ser sumamente útil, al menos como punto de par-



tida, para la clasificación y estudio del grafeno.

#### ALGUNAS CONSIDERACIONES FINALES

El entendimiento que brinda la física acerca de los fenómenos naturales, se expresa de manera sistemática utilizando un lenguaje matemático. Lo anterior permite, no sólo clasificar; sino cuantificar, en ocasiones con extraordinaria precisión, dichos fenómenos. Este hecho podría causar sorpresa, tal como lo refiere el premio Nobel de física Eugene Wigner, en su artículo titulado: “*The unreasonable effectiveness of mathematics in the natural science*”. Pero toda vez que ha probado ser cierto, debemos esperar que sistemas diferentes manifiesten fenómenos similares, en caso de ser descritos por una misma (o similar) ecuación. Ejemplos diversos de este tipo se presentan en la física, y la existencia de fenómenos cuasi-relativistas en el grafeno es uno de los más recientes. Esto ha permitido explicar algunos de los fenómenos que se observan en el grafeno, además de que ha permitido corroborar experimentalmente fenómenos predichos por la QED; pero que habían evadido, hasta ahora, su verificación experimental.

#### PARA SABER MÁS:

- Geim, A. K., MacDonald, A. H., ***Graphene: Exploring carbon flatland***, Physics Today, Vol. 60, Num. 35 (2007) pp. 35-41.
- Scientific American Video, “[Graphene - a 21st Century Wonder Discovery](#)”.

#### REFERENCIAS

- [1] K. C. Yung, W. M. Wu, M. P. Pierpoint y F. V. Kusmartsev, «Introduction to graphene electronics – a new era of digital transistors and devices», *Contemporary Physics*, vol. 54, n.º 5, págs. 233-251, sep. de 2013.
- [2] M. I. Katsnelson, *Graphene: CARBON in Two Dimensions*. Cambridge: Cambridge University Press, 2012.
- [3] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres y col., «The electronic properties of graphene», *Reviews of Modern Physics*, vol. 81, n.º 1, págs. 109-162, ene. de 2009.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙

## PRINCIPIO DE INVARIANCIA DE NORMA EN TEORÍAS DE CAMPO CUÁNTICAS

*Eugenio Ley Koo\**

**La teoría dinámica del campo electromagnético de Maxwell es invariante bajo transformaciones espacio temporales de Lorentz y bajo transformaciones de norma de los potenciales electromagnéticos. Esta contribución sirve de guía al público lector para conocer las historias sobre el papel del Principio de Invariancia de Norma en la formulación y desarrollo de las teorías de campo cuánticas, que han permitido entender las interacciones electromagnéticas, débiles y fuertes entre las partículas elementales. Específicamente, la Electrodinámica Cuántica, la Teoría de campo de Yang-Mills, la Dinámica Cuántica Electro débil, la Cromodinámica Cuántica, e intentos de Teorías de Gran Unificación.**

La teoría electromagnética de Maxwell ha sido el ejemplo de una teoría de campo clásica, invariante bajo transformaciones de Lorentz y bajo transformaciones de norma; estas últimas determinan la conservación de carga eléctrica y radiación electromagnética sin masa. La transformación de norma en la mecánica cuántica consiste en un cambio de fase de las funciones de onda, el cual corresponde geoméricamente a rotaciones en el plano complejo; tales rotaciones conmutan entre sí y forman el grupo unitario en una dimensión  $U(1)$  que, se dice, es un grupo Abelianiano.

En esta contribución se bosquejan las historias sucesivas del papel de la invariancia de norma en la formulación de las teorías de campo cuánticas sobre las interacciones electromagnéticas, débiles y fuertes en los núcleos atómicos y partículas elementales, los campos de Yang-Mills, el modelo de unificación Electro-Débil, la Cromodinámica Cuántica y modelos de gran unificación.

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

## ELECTRODINÁMICA CUÁNTICA

La Electrodinámica Cuántica, *QED* por sus siglas en inglés, hereda las propiedades clásicas del campo electrodinámico de Maxwell descritos en la Introducción, incorporando las propiedades cuánticas del campo de radiación incluyendo las propiedades de momento angular intrínseco de 1 en unidades de  $\hbar$  y paridad negativa para los fotones caracterizados como bosones por tener espín entero, y las propiedades cuánticas del electrón y de su antipartícula el positrón, con cargas  $\pm e$ , respectivamente, masas iguales  $m_e$ , espín  $1/2$  en unidades de  $\hbar$ , momentos magnéticos iguales de un magnetón de Bohr, y que obedecen el Principio de Exclusión de Pauli. En esta teoría la interacción entre los electrones se describe a través de la emisión y absorción de fotones; su formulación inicial fue implementada por Heisenberg y Pauli. En 1927, Dirac y Fermi la aplicaron en la aproximación de teoría de perturbaciones a primer orden para explicar las transiciones radiativas en los sistemas atómicos. En 1928, Dirac propuso la ecuación cuántica relativista lineal con la cual se explicaron las propiedades del electrón y se anticipó la existencia del positrón como su antipartícula; ambas partículas fueron detectadas en experimentos con rayos cósmicos por Anderson en 1931. En los años treinta, cuando la QED se quiso extender para cálculos de teoría de perturbaciones a segundo orden, se encontró que los resultados eran divergentes. Fue a fines de los cuarenta cuando nuevos resultados experimentales contribuyeron a la reformulación de la QED por Tomonaga, Schwinger, Feynman y Dyson. Efectivamente, Lamb y Retherford encontraron que los estados excitados  $2s_{1/2}$  y  $2p_{1/2}$  en el átomo de Hidrógeno, que de acuerdo con la ecuación de Dirac debían tener una misma energía, en realidad están desplazados entre sí. Por otra parte, según la ecuación de Dirac el momento magnético del electrón y del positrón es exactamente un magnetón de Bohr, pero las mediciones de Kusch y Foley mostraron que es como un milésimo mayor. Tomonaga, Schwinger y Feynman desarrollaron cada uno su propia versión de la QED para calcular esas diferencias finitas, implementando el llamado método de renormalización para mostrar que en cada orden de perturbación hay contribuciones infinitas que se cancelan entre sí; Dyson mostró la equivalencia de esas versiones. Aquí nos limitamos a citar un trabajo de cada uno de los tres primeros: *Sobre una Formulación Relativísticamente Invariante de la Teoría Cuántica de los Campos Ondulatorios*, *Sobre invariancia de Norma y Polarización del Vacío*, y *Enfoque Espacio-Temporal a la Electrodinámica Cuántica*, respectivamente, para destacar los papeles de las invariancias de Lorentz y de Norma en estas reformu-

laciones, por las cuales recibieron el Premio Nobel de Física en 1965: *por su trabajo fundamental en electrodinámica cuántica con consecuencias de sembrado profundo para la física de partículas elementales*. Diez años antes Lamb y Kusch recibieron el Premio Nobel correspondiente *por sus descubrimientos sobre la estructura fina del átomo de Hidrógeno y por la determinación precisa del momento magnético del electrón*.

### COMPONENTES DE LOS NÚCLEOS Y ESPÍN ISOTÓPICO

El neutrón fue descubierto e identificado por Chadwick en 1932 encontrando que su masa es ligeramente mayor que la del protón. También se reconoció que el protón y el neutrón son los componentes de los núcleos atómicos, por lo que comparten el nombre común de nucleones. Esto se refleja en la notación para representar a los núcleos:  ${}_Z\mathcal{E}_N^A$ , donde  $\mathcal{E}$  es el símbolo del átomo del elemento del que forma parte,  $Z$  es el número de protones,  $N$  es el número de neutrones y  $A = Z + N$  es el número de nucleones. Heisenberg propuso que el protón y el neutrón juegan papeles similares en la composición de los núcleos, y si se desprecian los efectos de la interacción electromagnética, se les puede asociar una propiedad intrínseca común que llamó espín isotópico, en analogía con el espín del electrón con el que comparte las matemáticas de las matrices de Pauli. Efectivamente, el nucleón puede existir en dos estados de carga  $Z = 1$  para el protón y  $Z = 0$  para el neutrón, ambos con  $A = 1$ ; si se les asocia un espín isotópico de  $T = 1/2$  con proyecciones posibles  $T_z = \pm 1/2$ , entonces sus cargas respectivas tienen la forma común  $Z = \frac{1}{2}A + T_z$ . Esta relación se extiende para los núcleos en general. Para  $A = 2$  solo existe el deuterón,  ${}_1H_1^2$ , con  $T = 0$  y  $T_z = 0$  como estado singulete de carga. Para  $A = 3$ ,  ${}_1H_2^3$  y  ${}_2He_1^3$  con  $T = 1/2$  y  $T_z = \pm 1/2$  forman un doblete de carga. Para  $A = 4$ ,  ${}_2He_2^4$  con  $T = 0$  y  $T_z = 0$  es también un singulete de carga.

### CAMPOS DE YANG-MILLS Y CONSERVACIÓN DE ESPÍN ISOTÓPICO

En 1954, Yang y Mills publicaron el artículo titulado: *Conservación de Espín Isotópico e Invariancia de Norma isotópica*, en el que tratan de entender la conservación de esa propiedad en asociación con un nuevo tipo de invariancia de norma en analogía con la conservación de carga eléctrica y la invariancia de norma en el campo electromagnético. De esta manera, identifican la existencia de un campo  $\vec{b}$  que tiene la misma relación con el espín isotópico como la que el campo electromagnético tiene con la carga eléc-

trica, señalando que dicho campo satisface ecuaciones diferenciales no lineales. Los cuantos del campo  $\vec{b}$  son partículas con espín unitario y cargas eléctricas  $\pm e$  y cero.

A continuación aquí se explican los elementos que establecen las diferencias entre el campo  $\vec{b}$  de Yang y Mills y el campo electromagnético. Efectivamente, mientras las transformaciones de norma del último están basadas en el grupo Abelian  $U(1)$  para rotaciones en un plano, las transformaciones de norma de espín isotópico están basadas en el grupo  $SU(2)$  para rotaciones en tres dimensiones, que es un grupo no Abelian porque las componentes del espín isotópico no conmutan entre sí. Correspondientemente, el carácter no lineal de las ecuaciones diferenciales satisfechas por el campo  $\vec{b}$  está asociado al conmutador no nulo de sus componentes  $[b_\mu, b_\nu]$ . Esta situación no se da en el caso de la teoría lineal electromagnética, en que el fotón no tiene carga eléctrica. En el caso del campo  $\vec{b}$  sus tres estados de carga indican que forman un triplete de espín isotópico con  $T = 1$  y  $T_z = 1, 0, -1$ .

Por otra parte, el fotón como cuanto del campo electromagnético no tiene masa. La invariancia de norma requiere que los cuantos del campo  $\vec{b}$  también tengan masa nula. En el caso de la interacción nucleón-nucleón el alcance finito de la misma permitió a Yukawa estimar la masa de los intermediarios de la misma. La identificación experimental de los mesones  $\pi^+$ ,  $\pi^0$ ,  $\pi^-$  como un triplete de espín isotópico, sus masas de 140 MeV para los cargados y 135 MeV para el neutro, y su carácter pseudoescalar por tener espín nulo y paridad negativa, confirmaron la propuesta de Yukawa.

Pauli objetó en un seminario de Yang su propuesta del campo  $\vec{b}$  al preguntar cuál es la masa de los cuantos del mismo. En el trabajo de Yang y Mills se reconocen las dos posibilidades: masa nula impuesta por la invariancia de norma; masas no nulas para interacciones de corto alcance, siendo éste último del orden de  $10^{-13}$  cm en la interacción nucleón-nucleón, y cero para el decaimiento beta para la interacción puntual de Fermi. Pauli dudaba la utilidad o aplicabilidad de la propuesta de Yang para explicar las interacciones nucleares y entre partículas elementales, en sus modalidades de fuertes y débiles.

#### DECAIMIENTOS NUCLEARES BETA E INTERACCIONES DÉBILES EN PARTÍCULAS ELEMENTALES

Como preludeo a los trabajos que condujeron al modelo de unificación de las interacciones electromagnética y débiles, es necesario explicar breve-

mente la teoría de Fermi sobre las últimas empezando con el decaimiento  $\beta$  en su modalidad más simple en el neutrón:  ${}_0n_1 \rightarrow {}_1p_0 + e^- + \nu_e$ , en que esa partícula se transforma en un protón acompañado de la emisión de un electrón y de un neutrino. Esta última partícula fue postulada por Pauli en 1931 para explicar el espectro continuo de los electrones o rayos  $\beta$  en los decaimientos de este tipo en los núcleos, suponiendo que su masa es muy pequeña, y que se lleva parte de la energía y de la cantidad de movimiento disponible en el proceso entre los niveles de energía discretos de los núcleos; su carga eléctrica es nula como lo indica su nombre; el electrón, el protón y el neutrón tienen espines de  $\hbar/2$ , y la conservación de momento angular requiere que el neutrino también tenga un espín del mismo valor.

Fermi formuló la teoría del decaimiento beta en 1934, incorporando la hipótesis del neutrino de Pauli en analogía con la interacción electromagnética con una densidad de energía  $-(1/c)J_\mu A_\mu$ , contracción de los cuadvectores de densidad de corriente y carga y de potenciales electromagnéticos vectorial y escalar. Él propuso la densidad de energía para el decaimiento del neutrón como la contracción de dos cuadvectores de corrientes neutrón-protón y electrón-neutrino:

$$G_F J_\mu^N J_\mu^L = G_F (\bar{\Psi}_p \gamma_\mu \Psi_n) (\bar{\Psi}_\nu \gamma_\mu \Psi_e),$$

donde  $\gamma_\mu$  son las matrices de la ecuación de Dirac con propiedades de cuadvectores en el espacio-tiempo; se reconocen las corrientes cuadvectoriales nucleónicas y leptónicas contraídas entre sí, y la creación del par de leptones, así llamados por ser partículas ligeras. Las funciones de onda de los nucleones y los leptones se toman en una misma posición e instante reflejando que la interacción es puntual e instantánea en el espacio-tiempo. En resumen, se habla de la interacción puntual y vectorial de Fermi, con una constante de acoplamiento  $G_F$  que, de acuerdo con mediciones, resulta ser mucho menor que la constante de acoplamiento electromagnético  $e^2/\hbar c$ , justificando el nombre de interacciones débiles.

Productos de las matrices de Dirac incluyen la matriz unidad con propiedades de un escalar ( $S$ ), un tensor antisimétrico  $T_{\mu\nu} = \gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu$  ( $T$ ), un pseudoescalar  $\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4 = \gamma_5$  ( $P$ ), y un pseudovector o vector axial  $\gamma_5 \gamma_\mu$  ( $A$ ), donde los adjetivos caracterizan sus comportamientos bajo la operación de paridad:  $x \rightarrow -x$ ,  $y \rightarrow -y$ ,  $z \rightarrow -z$ . Concretamente, ( $S, T, A$ ) tienen paridad positiva y ( $V, P$ ) negativa. La teoría de Fermi se extendió para incluir superposiciones lineales de contracciones de corrientes nucleónicas y leptónicas de los cinco tipos, y en los siguientes veinte años el objetivo de las mediciones de espectroscopía beta fue determinar la proporción de cada

una de ellas.

Si consideramos el decaimiento  $\beta^-$  de un núcleo  ${}^A_Z\mathcal{E}_N \rightarrow {}^A_{Z+1}\mathcal{E}_{N-1} + e^- + \bar{\nu}_e$  el término conjugado hermitiano para el decaimiento del neutrón  $(\bar{\Psi}_n\gamma_\mu\Psi_p)(\bar{\Psi}_e\gamma_\mu\Psi_\nu)$  sugiere otros procesos:  ${}^A_Z\mathcal{E} \rightarrow {}^A_{Z-1}\mathcal{E}_{N+1} + \beta^+ + \nu_e$ ,  ${}^A_Z\mathcal{E} + e^- \rightarrow {}^A_{Z-1}\mathcal{E}_{N+1} + \nu_e$ ,  ${}^A_Z\mathcal{E}_N + \bar{\nu}_e \rightarrow {}^A_{Z-1}\mathcal{E}_{N+1} + e^+$ , que eventualmente se observaron y que se llaman respectivamente decaimiento  $\beta^+$ , captura electrónica, y decaimiento  $\beta$  inverso con un mismo producto nuclear. Específicamente el último, para el caso del protón bombardeado con neutrinos  $\frac{1}{2}p_0 + \bar{\nu}_e \rightarrow \frac{1}{2}n_1 + e^+$  del decaimiento  $\beta^-$  de neutrones en el reactor del Río Savana, condujo en 1956 a la detección del neutrino, mediante la captura de los neutrones producto en  $Cd + n \rightarrow Cd^* + \gamma$ , y la aniquilación del positrón  $e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma$  a través de la detección de los tres rayos  $\gamma$  en coincidencia, por Reines y Cowan.

Por otra parte, de las partículas elementales descubiertas en el estudio de los rayos cósmicos en los años 40 se identificaron los mesones predichos por Yukawa en tres estados de carga, llamados piones  $\pi^+$ ,  $\pi^-$ ,  $\pi^0$ . Las versiones cargadas muestran decaimiento  $\pi^\pm \rightarrow \mu^\pm + \nu$  con productos también cargados llamados muones, y la versión neutra decae electromagnéticamente en dos rayos  $\gamma$ :  $\pi^0 \rightarrow \gamma + \gamma$ . A su vez, los muones exhiben decaimiento beta  $\mu^\pm \rightarrow e^\pm + \nu + \bar{\nu}$ , con espectros de energía continuos para los electrones. Para principios de los años cincuenta en los rayos cósmicos también se descubrieron pares de partículas, una más pesada que el protón y otra más pesada que los piones, a los que se asociaron los nombres de hiperones y mesones, respectivamente. En aceleradores también empezaron a estudiar reacciones para producirlos:  $p+p \rightarrow p+n+\pi^+$ ,  $p+n \rightarrow p+p+\pi^-$ ,  $\pi^- + p \rightarrow \theta^0 + \Lambda^0$ ,  $\pi^- + p \rightarrow \tau^0 + \Lambda^0$ ,  $\pi^+ + n \rightarrow \theta^+ + \Lambda^0$ ; y también estudiar sus decaimientos  $\theta \rightarrow \pi + \pi$ ,  $\tau \rightarrow \pi + \pi + \pi$ ,  $\Lambda^0 \rightarrow n + \pi^0$ ,  $\Lambda \rightarrow p + \pi^-$ . En estos experimentos se determinan las masas, los espines, vidas medias de las nuevas partículas: mesones  $\theta$  y  $\tau$ , cada uno con dos estados de carga y el hiperón  $\Lambda^0$  sin carga.

Los mesones  $\pi$ ,  $\theta$ ,  $\tau$  comparten espín cero y paridad negativa, y los dos últimos masas, vidas medias y espín isotópico 1/2. El hiperón  $\Lambda^0$  comparte el espín 1/2 y paridad positiva de los nucleones y, por ser un estado singlete, su espín isotópico es nulo. En las reacciones de producción de mesones se reconoce la conservación de momento angular, de paridad y de espín isotópico. En contraste, en el decaimiento de los nuevos mesones se reconoció un problema que se llamó el rompecabezas  $\theta-\tau$ . Efectivamente, la igualdad de sus masas y vidas medias sugiere que se trata de una misma partícula; pero sus decaimientos en dos y tres piones, respectivamente, no



son compatibles con las conservaciones de paridad y de espín isotópico.

Lee y Yang en 1956 reconocieron que mientras en las interacciones electromagnética y nucleón-nucleón había bases empíricas de la conservación de paridad, en los procesos de decaimiento beta e interacciones débiles, en general no existía tal base. El rompecabezas  $\theta$ - $\tau$  les sugirió que era necesario examinar la validez de la conservación de paridad en las interacciones débiles, y propusieron varios experimentos para decidir sobre esa validez y resolver el rompecabezas. Para principios de 1957 se empezaron a reportar los resultados de tales experimentos: el Cobalto 60 polarizado emite rayos  $\beta$  preferentemente en la dirección opuesta a la dirección de su momento magnético; en la secuencia de decaimientos  $\pi^\pm \rightarrow \mu^\pm \rightarrow e^\pm$  se estableció que hay una emisión máxima de  $e^+$  en la dirección opuesta al movimiento del  $\mu^\pm$ . Para el verano varios grupos de investigación establecieron que los rayos  $\beta^-$  son emitidos preferentemente con sus espines opuestos a la dirección de su movimiento, como un tornillo *a mano izquierda*, y lo mismo ocurre en los neutrinos  $\nu$ ; en cambio, sus antipartículas, rayos  $\beta^+$  y  $\bar{\nu}$  se comportan como tornillos *a mano derecha*. En el otoño de 1957 Lee y Yang recibieron el premio Nobel *por su investigación penetrante de las llamadas leyes de paridad que ha conducido a importantes descubrimientos sobre las partículas elementales*.

La solución al rompecabezas  $\theta$ - $\tau$  es que se trata de una misma partícula en dos estados de carga  $K^+$ ,  $K^0$ , y espín isotópico 1/2. En sus decaimientos no se conserva la paridad y por lo tanto los productos pueden ser dos o tres piones:  $K^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^0$ ,  $K^+ \rightarrow \pi^+ + \pi^0 + \pi^0$ ,  $K^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^-$ ,  $K^0 \rightarrow \pi^+ + \pi^- + \pi^0$ . También existen sus antipartículas  $\bar{K}^-$ ,  $\bar{K}^0$  con las mismas propiedades de masa, vidas medias, espín y paridad, pero cargas eléctricas de signo opuesto.

En el mismo año de 1957, Landau, Lee y Yang, y Salam propusieron separadamente la teoría de neutrinos con dos componentes, considerando la descripción de neutrinos con masa cero en la ecuación de Dirac y con la máxima violación de paridad  $\nu_D$ ,  $\nu_I$ ,  $\bar{\nu}_D$ ,  $\bar{\nu}_I$ , donde  $D$  e  $I$  corresponden a derecha e izquierda. En las interacciones débiles participan solamente neutrinos levógiros  $\nu_I$  y antineutrinos dextrógiros  $\bar{\nu}_D$ . Para 1958, Marshak y Sudarshan, Feynman y Gell-Mann, y Sakurai formularon la ley V-A del decaimiento beta que llamaron invariancia de quiralidad, formulación de dos componentes de espinores de Dirac, e invariancia bajo reversión de masa, respectivamente, siendo las tres equivalentes al uso de los neutrinos y antineutrinos del párrafo previo. Experimentos adicionales: de decaimientos sucesivos del  $^{157}\text{Eu}(0^-) + e^- \rightarrow ^{152}\text{Sm}^*(1^+) + \gamma$  por captura electrónica, y desexcitación  $^{152}\text{Sm}^*(1^-) \rightarrow ^{152}\text{Sm}(0^+) + \gamma$ , con medición de la proyección

del espín del rayo  $\gamma$  a lo largo de su movimiento, confirmó la presencia de  $\bar{\nu}_l$  en el primero; medición de distribución angular de electrones emitidos por neutrones polarizados, y la detección del decaimiento beta del pión positivo  $\pi^+ \rightarrow \beta^+ + \nu$ . Todos estos experimentos llevaron a la confirmación de la *ley V menos A de la interacción universal de Fermi en las interacciones débiles*, que implica una corriente de leptones con la diferencia de contribuciones vectorial y pseudovectorial en casi la misma proporción y signos opuestos, con la consecuente violación máxima de paridad. Es interesante reconocer explícitamente que Fermi propuso la teoría más simple de decaimiento beta con acoplamiento vectorial y conservación de paridad. La teoría extendida incorporó los otros acoplamientos escalar, tensorial, pseudovectorial y pseudoescalar manteniendo la conservación de paridad. La violación de paridad reconocida en los experimentos de 1957 y 1958 seleccionó la superposición de V-A, y eliminó las de *S*, *T* y *P*. Adicionalmente, la interacción de Fermi es puntual y por lo tanto no es renormalizable.

#### UNIFICACIÓN DE INTERACCIONES DÉBIL Y ELECTROMAGNÉTICA

La búsqueda de una teoría invariante de norma y renormalizable para las interacciones débiles no fue exitosa. Sin embargo, tal teoría para la unificación electrodébil, formulada en los 60 por Glashow, Weinberg y Salam, tuvo predicciones que se pusieron a prueba en los 70 y culminaron con la detección de los bosones vectoriales intermediarios de las interacciones débiles por equipos dirigidos por Rubbia y Van der Meer en CERN desde la primera mitad de los 80.

Es instructivo reconocer las diferencias entre las interacciones electromagnética y débil para apreciar las dificultades en la tarea de su unificación:

- 1) La gran diferencia entre sus constantes de acoplamiento
- 2) El alcance infinito de la interacción de Coulomb contra el alcance casi nulo en la interacción de Fermi, con la implicación de
- 3) La masa nula del fotón y las grandes masas para los bosones intermediarios débiles y
- 4) La conservación y la violación máxima de paridad exhibida por las respectivas interacciones.

También es necesario reconocer que en la década de los sesenta ya se reconoció la estructura de quarks de los nucleones:  $p( uud )$  y  $n( udd )$ , mesones  $\pi^+( u\bar{d} )$ ,  $\pi^0( u\bar{u}, d\bar{d} )$ ,  $\pi^-( \bar{u}d )$ , y sus compañeros extraños en los octetos de Gell-Mann y Ne'eman. Adicionalmente, Ledermann, Schwartz y Steinberg establecieron experimentalmente la diferencia entre los neutrinos del electrón y del muón en 1962:  $\pi^- \rightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu$ ,  $\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu$ ,  $\pi^- \rightarrow e^- + \bar{\nu}_e$ ,  $\pi^+ \rightarrow e^+ + \nu_e$ ,  $\mu^- \rightarrow e^- + \nu_\mu + \bar{\nu}_e$ ,  $\mu^+ \rightarrow e^+ + \bar{\nu}_\mu + \nu_e$ ; los neutrinos del muón al ser capturados por nucleones producen muones pero no electrones, y los neutrinos del electrón al ser capturados por nucleones producen electrones pero no muones. También se tienen leyes de conservación de los números leptónicos respectivos:  $+1(e^-, \nu_e)$ ,  $-1(e^+, \bar{\nu}_e)$ ,  $+1(\mu^-, \nu_\mu)$ ,  $-1(\mu^+, \bar{\nu}_\mu)$ .

Glashow reconoció que antes de este descubrimiento se habían tenido las analogías  $np\Lambda^0$  y  $e\nu\mu$ , o en términos de quarks  $dus$ . Después del descubrimiento se puede restituir la analogía de dobletes  $(np)$ ,  $(e\nu_e)$ ,  $(ud)$ , y  $(\mu\nu_\mu)$ , la cual sugiere la existencia de otro quark  $[sc]$  con  $c$  de *charm* o encanto. En conjunto se tienen dobletes de quarks y leptones de primera y segunda generación.

Para cada generación la existencia de dobletes leptónicos con conservación del isospín leptónico correspondiente, permiten aplicar la teoría de Yang-Mills en base al grupo  $SU(2)$ . Por lo que se refiere a las interacciones débiles con violación máxima de paridad, sólo las componentes izquierdas de los leptones  $(\nu_e, e^-)_L$  como dobletes son las que participan y las componentes derechas  $\nu_{eR}$  y  $e^-_R$  como singuletes no participan; para las antipartículas aparecen las componentes derechas e izquierdas respectivas. En cada caso las correspondientes componentes de quarks complementarias son las que participan o no. La invariancia de norma No Abeliiana requiere la existencia de un triplete de bosones intermedarios  $b^+, b^0, b^-$  con masa nula. Los quarks y los leptones de los dobletes pueden emitir o absorber tales bosones:

$$d \rightleftharpoons u + b^-, \quad d \rightleftharpoons d + b^0, \quad u \rightleftharpoons d + b^+, \quad u \rightleftharpoons u + b^0,$$

$$e^- \rightleftharpoons \nu_e + b^-, \quad e^- \rightleftharpoons e^- + b^0, \quad \nu_e \rightleftharpoons e^- + b^+, \quad \nu_e \rightleftharpoons \nu_e + b^0$$

y todos estos procesos tienen la misma constante de acoplamiento.

Adicionalmente, se introduce un acoplamiento de hipercarga débil asociado con el grupo  $U(1)$ . Los dos quarks tienen la hipercarga  $\eta'$ , y los dos leptones tienen la hipercarga  $\eta$ . La invariancia de norma Abeliiana requiere la existencia de un bosón vectorial intermedario  $X^0$  con hipercarga cero y masa nula. Los quarks y los leptones pueden emitir y absorber un bosón

intermediario:

$$\begin{aligned} d &\rightleftharpoons d + X^0, & u &\rightleftharpoons u + X^0, & \text{con acoplamiento } \eta, \\ e^- &\rightleftharpoons e^- + X^0, & \nu_e &\rightleftharpoons \nu_e + X^0, & \text{con acoplamiento } \eta'. \end{aligned}$$

Aquí no se distingue entre componentes izquierdas y derechas.

Mientras Glashow propuso los grupos  $SU(2) \otimes U(1)$  de simetría de norma, Weinberg y Salam en 1967 y 1968 propusieron el mecanismo de Higgs de rompimiento de simetría para resolver el problema de las masas de los bosones intermediarios débiles y del fotón sin masa. Ese mecanismo se implementa introduciendo un campo escalar con momento angular cero y paridad positiva, y espín isotópico que es el campo de Higgs. El rompimiento de simetría consiste en que la solución no comparte la simetría de norma de la interacción. La solución de energía mínima corresponde a un espinor  $(\phi_0, 0)$  y no al campo de vacío  $(0, 0)$ . La analogía de la transición ferromagnética corresponde a que por debajo de la temperatura de Curie hay una magnetización  $M$  en dirección definida, y por encima no la hay. El estado de vacío tiene una dirección definida en el espacio de espín isotópico al romperse la simetría de norma determinada por  $\phi_0$ . En consecuencia, los bosones vectoriales intermediarios de las interacciones débiles  $W^+$ ,  $Z^0$ ,  $W^-$  adquieren masa y el intermediario electromagnético  $A$  permanece sin masa. Las conexiones entre los campos intermediarios neutros con y sin rompimiento de simetría son lineales y ortogonales:

$$\begin{aligned} A &= X^0 \cos \theta_W + b^0 \sin \theta_W, \\ Z^0 &= -X^0 \sin \theta_W + b^0 \cos \theta_W, \end{aligned}$$

donde  $\theta_W$  es el llamado ángulo de Weinberg. Mientras  $A$  tiene masa nula,  $Z^0$  adquiere una masa  $M_Z$  y los campos intermediarios cargados adquieren la misma masa  $M_W$ . A su vez, el alcance de la interacción electromagnética es infinita, y los alcances de las interacciones débiles neutra y cargadas son muy cortos. Las constantes de acoplamiento respectivas son también diferentes. El acoplamiento de los quarks y los leptones con el campo electromagnético es diferente del acoplamiento con el campo de hipercarga débil  $X^0$  y los miembros de los dobletes de isospín adquieren las cargas eléctricas que les corresponden a cada uno. Los bosones intermediarios cargados  $W^\pm$  involucran corrientes débiles cargadas. Estas últimas muestran máxima violación de paridad al involucrar el acoplamiento con leptones y quarks izquierdos solamente. En cambio, las corrientes neutras involucran tanto al  $b^0$  acoplados a quarks y leptones izquierdos como al  $X^0$  que no

distingue entre izquierda y derecha en su acoplamiento. Si  $g_1$  es la constante de acoplamiento del campo de hipercarga con  $X^0$ , y  $g_2$  es la constante de acoplamiento con el campo de isospín débil  $\vec{b}$ , entonces la simetría de norma electromagnética  $U_{em}(1)$  determina sus conexiones con el ángulo de Weinberg y la constante de acoplamiento electromagnético:

$$\tan \theta_W = \frac{g_1}{g_2}, \quad e = \frac{g_1 g_2}{\sqrt{g_1^2 + g_2^2}} = g_1 \cos \theta_W = g_2 \sin \theta_W.$$

También se tienen las relaciones con las masas de los bosones intermedios cargados y neutro, y la constante de acoplamiento de Fermi:

$$G_F = \frac{g_2^2}{4\sqrt{2}m_W^2} = \frac{g_1^2 + g_2^2}{4\sqrt{2}m_Z^2}.$$

Las predicciones más importantes del modelo de unificación electrodébil corresponden a los procesos mediados por  $Z^0$  y las corrientes débiles neutras, y la producción y detección de los bosones intermedios.

Glashow, Weinberg y Salam no abordan el problema de la renormalización de la dinámica cuántica electrodébil. QED es más complicado que QED por el mayor número de procesos involucrados. En 1972 Veltman y 't Hooft mostraron la renormalizabilidad de las interacciones electrodébiles usando un programa de manipulación simbólica para clasificar y calcular las contribuciones para procesos específicos desarrollado por el primero. Ellos lograron identificar y eliminar contribuciones infinitas de clases de diagramas de Feynman, así como evaluar contribuciones finitas por el método de regularización dimensional.

En los años subsecuentes se realizaron experimentos que son mediados por  $Z^0$ . En 1973  $\nu_\mu + p \rightarrow \nu_\mu + p + \pi^+ + \pi^-$ ; en 1978 actividad óptica de un vapor de bismuto; dispersión de electrones longitudinalmente polarizados por blancos de deuterones; y en 1974–1977 reacciones  $e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-$  y  $e^+e^- \rightarrow \tau^+\tau^-$ , donde  $\tau$  es el leptón de tercera generación.

Para mediados de los 70 ya se tenían predicciones específicas sobre las masas de los bosones intermedios  $W^\pm$ ,  $Z^0$ , anchuras parciales de canales de decaimiento, y secciones transversales de producción de los mismos. Para fines de la década se inició en CERN la construcción del anillo de almacenamiento y colisión de protones y antiprotones; y en 1981 entró en operación con haces de ambos de 270 GeV cada uno. En 1983, se reportaron las reacciones de producción y de decaimiento:

$$p + \bar{p} \rightarrow W^+ + W^-, \quad W^\pm \rightarrow e^\pm + \nu_e, \quad W^\pm \rightarrow \mu^\pm + \nu_\mu,$$

$$p + \bar{p} \rightarrow Z^0 + Z^0, \quad Z^0 \rightarrow e^+ + e^-, \quad Z^0 \rightarrow \mu^+ + \mu^-.$$

Glashow, Weinberg y Salam recibieron el Premio Nobel en 1979 *por sus contribuciones a la teoría unificada de las interacciones electromagnética y débil entre partículas elementales, incluyendo, inter alia, la predicción de la corriente débil neutra.*

Rubbia y Van der Meer recibieron el Premio Nobel en 1984 *por sus contribuciones decisivas que llevaron al descubrimiento del campo de partículas W y Z intermediarios en la interacción débil.*

#### FENOMENOLOGÍA DE INTERACCIONES FUERTES

Para discutir las interacciones fuertes entre los nucleones y piones, y sus extensiones para incluir el hiperón  $\Lambda^0$  y los mesones  $K^0, K^+$  es necesario primero completar la historia de la producción e identificación de partículas adicionales de los tipos respectivos. Empezamos con la terminología misma: tomando en cuenta que el protón y el neutrón forman los núcleos de los átomos, e interaccionan entre sí intercambiando piones como la propuso Yukawa. Se considera que los nucleones y los piones son partículas de materia ordinaria. El hiperón  $\Lambda^0$  y los kaones se llamaron partículas de materia extraña, en contraste con la materia familiar ordinaria. El estudio experimental de los rayos cósmicos condujo a su descubrimiento en trazas en placas fotográficas desde la década de los 40, y en los 50 también se produjeron en aceleradores. Los compañeros de  $\Lambda^0$  se identificaron como un triplete de espín isotópico  $\Sigma^-, \Sigma^0$  y  $\Sigma^+$  con masas mayores, en el mismo tipo de reacciones pión-nucleón, y con la producción asociada de kaones  $\pi^- + n \rightarrow \Sigma^- + K^0, \pi^- + p \rightarrow \Sigma^0 + K^+, \pi^+ + n \rightarrow \Sigma^+ + K^0$ . En placas fotográficas de los cuarenta se identificó otro hiperón aún más masivo que se designó  $\Xi^0$ . Los decaimientos respectivos son  $\Sigma^- \rightarrow n + \pi^-, \Sigma^0 \rightarrow p + \pi^-, \Sigma^+ \rightarrow n + \pi^+, \Sigma^+ \rightarrow p + \pi^0$  y  $\Xi^0 \rightarrow \Sigma^- + \pi^+$ . El lector puede verificar que en las reacciones de producción hay conservación de espín isotópico  $\vec{1} + \frac{\vec{1}}{2} = \vec{1} + \frac{\vec{1}}{2}$  para el triplete de piones y el doblete de nucleones y para el triplete de  $\Sigma$  y el doblete de kaones. En cambio, en los procesos de decaimiento  $\vec{1} \neq \vec{1} + \frac{\vec{1}}{2}$  el espín isotópico no se conserva. En el caso de  $\Lambda^0$ :  $\vec{1} + \frac{\vec{1}}{2} = \vec{0} + \frac{\vec{1}}{2}$  y  $\vec{0} \neq \frac{\vec{1}}{2} + \vec{1}$  se tiene la misma situación. En el caso de los piones,  $\pi^+$  y  $\pi^-$  son uno la antipartícula del otro, y  $\pi^0$  es su propia antipartícula. Para los kaones,  $K^0$  y  $K^+$  tienen sus antipartículas  $\bar{K}^0$  y  $\bar{K}^-$ .

El conjunto de nucleones e hiperones se les llama bariones por ser partículas pesadas y se les asocia el número bariónico  $B = 1$ , extensión natural

del número nucleónico  $A$ . En el caso de núcleos y átomos,  $A$  es también el número de masa como el número entero más próximo a la masa correspondiente en unidades atómicas de masa. Los mesones son partículas con masas intermedias entre las del protón y del electrón, y les corresponde un número bariónico  $B = 0$ . Los bariones y mesones interactúan fuertemente entre sí; la interacción fuerte también se llama interacción hadrónica y el nombre común de bariones y mesones es hadrones. Adicionalmente el conjunto de bariones en discusión comparte las propiedades de espín y paridad  $I^P = \frac{1}{2}^+$  de los nucleones, y el conjunto de mesones tiene las mismas propiedades  $I^P = 0^-$  de los piones.

A continuación consideramos la clasificación de estas familias de hadrones y la identificación del nuevo grado de libertad y constante de movimiento que se llamó extrañeza, realizada por Gell-Mann y Ne'eman en lo que se conoció como el Modelo de Octete. Para los hadrones ordinarios la relación entre carga eléctrica, espín isotópico y número bariónico es  $Q = T_z + B/2$ , como se puede verificar para los nucleones con  $T_z = \mp 1/2$  y  $B = 1$ , y para los piones con  $T_z = -1, 0, 1$  y  $B = 0$ . Para los hadrones extraños la relación se extendió introduciendo el número de extrañeza  $S$ , que vale cero para los hadrones ordinarios, 1 para el doblete de kaones  $K^0, K^+$  y  $-1$  para el doblete de antikaones  $\bar{K}^0, \bar{K}^-$ , y  $-1$  para los hiperones  $\Lambda^0$  singulete y  $\Sigma^-, \Sigma^0, \Sigma^+$  triplete, y la llamada relación de Gell-Mann-Nishijima  $Q = T_z + \frac{1}{2}(B + S)$ . La combinación  $B + S$  se le llamó *hipercarga*. Los octetes de bariones y mesones se ilustran en las gráficas de espín isotópico contra extrañeza:

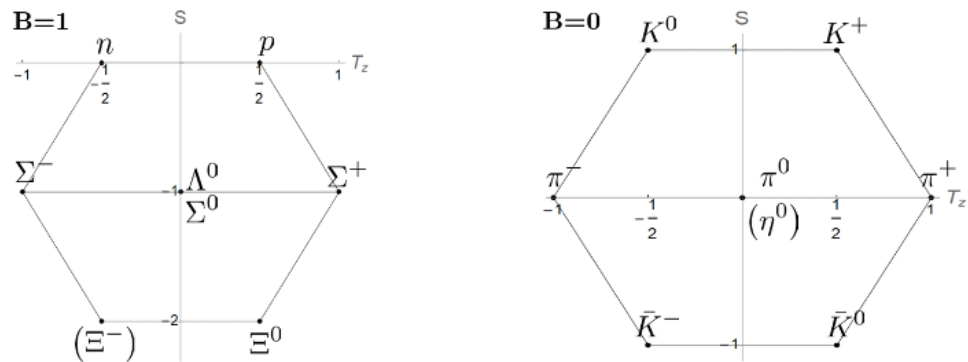


Figura 45.1:  $B = 1$  Octete de Bariones.  $B = 0$  Octete de Mesones.

La localización de los hadrones en los respectivos diagramas de espín isotópico-extrañeza y los centros de carga de cada multiplete indica que la

extrañeza mide la desviación de los centros de carga con respecto al de la materia ordinaria.

Gell-Mann basó su análisis en el grupo  $SU(3)$  de matrices unitarias como la extensión natural del grupo  $SU(2)$  de espín isotópico con la incorporación de la extrañeza como un grado de libertad adicional. La representación básica del  $SU(3)$  es de dimensión 3. La representación que sigue  $3 \otimes 3 = 8 + 1$  involucra un octete y un singulete; y la que sigue  $3 \otimes 3 \otimes 3 = 1 + 8 + \bar{8} + 10$  un singulete, dos octetes y un decuplete. La propuesta de Gell-Mann tuvo valor predictivo desde un principio: en el caso de los kaones inicialmente se pensó que podían formar un triplete  $K^-, K^0, K^+$  como en el caso de los piones, pero el modelo de octete reconoció la diferencia entre  $K^0, \bar{K}^0$  y los dobles de espín isotópico de kaones y antikaones; en el caso de  $\Xi^0$  no se sabía la multiplicidad de estados de carga, pero el modelo de octete predijo que debía ser un doblete como lo indica su compañero ( $\Xi^-$ ) en paréntesis en la figura de los hiperones para completar el supermultiplete de 8. En el caso de los mesones, el triplete de piones y los dos dobles de kaones dan siete miembros; la analogía del  $\Lambda^0$  sugiere la existencia de un mesón singulete con carga cero en el centro de la figura ( $\eta^0$ ) para completar el octete. La existencia de las partículas en paréntesis eventualmente se confirmó experimentalmente.

Para principios de los 60 se realizaron experimentos que extendieron al cuarteto de resonancias nucleón-piÓN  $N^{*-}, N^{*0}, N^{*+}, N^{*++}$ , identificadas por Fermi desde los 50, para incluir las resonancias mesón-hiperón:  $\Sigma^{*-}, \Sigma^{*0}, \Sigma^{*+}$  en el triplete con  $S = -1$ , el doblete  $\Xi^{*-}, \Xi^{*0}$  con  $S = -2$  y el singulete  $\Omega^-$  con  $S = -3$ , como miembros de la predicción de un decuplete con  $I^P = \frac{3}{2}^-$ . También se produjo el octete de resonancias mesónicas pseudovectoriales con  $I^P = 1^+$  en un triplete  $\rho^-, \rho^0, \rho^+$ , un singulete  $\omega^0$ , y dos dobles extraños  $K^{*0}, K^{*+}$  y  $\bar{K}^{*0}, \bar{K}^{*-}$ .

La resonancia  $\Omega^-$  se produjo e identificó en 1963. En la cascada de sus decaimientos también se detectó el hiperón  $\Sigma^-$ . Gell-Mann recibió el premio Nobel de Física en 1969: *por sus contribuciones y descubrimientos en la clasificación de partículas elementales y sus interacciones.*

## EL MODELO DE QUARKS Y LA CROMODINÁMICA CUÁNTICA

Gell-Mann tomó en serio la representación básica del grupo  $SU(3)$ , al proponer el modelo de quarks para explicar la estructura de los hadrones. Las partículas del modelo son 3: con espín isotópico de  $1/2$  y extrañeza cero el doblete down y up ( $d, u$ ), como el neutrón y protón, y espín iso-



tópico cero y extrañeza  $-1$  strange ( $s$ ), como el hiperón  $\Lambda^0$ . El elemento novedoso es que sus respectivos números de carga:  $-1/3$ ,  $2/3$ ,  $-1/3$  y bariónico  $B = 1/3$  son fraccionarios y están conectados por la fórmula de Gell-Mann-Nishijima. Entonces, la estructura de los hiperones involucra tres de esos quarks:  $n(duu)$ ,  $p(duu)$ ,  $\Lambda^0(dus)$ ,  $\Sigma^-(dds)$ ,  $\Sigma^0(dus)$ ,  $\Sigma^+(uus)$ ,  $\Xi^-(dds)$ ,  $\Xi^0(uss)$ . La estructura de los mesones está determinada por combinaciones de quarks y antiquarks con propiedades de carga, espín isotópico, número bariónico  $B = 0$ , y extrañeza con signos opuestos:  $\pi^-(d\bar{u})$ ,  $\pi^0(d\bar{d} + u\bar{u})$ ,  $\pi^+(u\bar{d})$ ,  $K^0(d\bar{s})$ ,  $K^+(u\bar{s})$ ,  $\bar{K}^0(\bar{d}s)$ ,  $\bar{K}^-(\bar{u}s)$ ,  $\eta^0(-d\bar{d} + u\bar{u})$ . Las resonancias respectivas comparten las mismas composiciones de quarks, y con los complementos de  $N^-(ddd)$ ,  $N^{+++}(uuu)$  y  $\Omega^-(sss)$  para las esquinas del decuplete.

En el caso de los bariones en el octete, el espín y la paridad común de los mismos y de sus componentes permite reconocer que el momento angular orbital de los últimos es nulo. En cambio, en el caso de las resonancias del decuplete con  $I^P = \frac{3}{2}^-$ , el momento angular orbital es  $l = 1$  y paridad  $P$  negativa. También se debe reconocer el carácter fermiónico de los quarks mismos, con la consecuencia de que las funciones de onda de los bariones deben ser antisimétricas bajo el intercambio de dos de ellos, y que es equivalente al Principio de Exclusión de Pauli de que en cada estado bariónico cada estado cuántico de los quarks puede ser ocupado por sólo uno de ellos. Desde luego, los estados de cada quark involucran los grados de libertad espaciales, de espín de rotación  $I$ , y de espín isotópico y de extrañeza. Los dos primeros tipos son comunes dentro de cada supermultiplete (octete y decuplete), y los dos últimos dentro de cada multiplete de espín isotópico y su extrañeza. En los dobletes de espín isotópico de nucleones y  $\Xi$  se tienen dos quarks en el mismo estado, y lo mismo ocurre en los estados cargados del triplete  $\Sigma^\pm$ ; el último renglón del párrafo anterior ilustra partículas con tres quarks en el mismo estado.

La propuesta adicional de Gell-Mann y Greenberg para resolver esta contradicción entre el modelo de quarks y el Principio de Exclusión de Pauli fue asociarle una propiedad adicional a los quarks a la que llamaron *color*. El color puede tomar tres valores posibles: rojo ( $r$ ), verde ( $v$ ) y azul ( $a$ ) para los quarks y antirrojo ( $\bar{a}$ ), antiverde ( $\bar{v}$ ) y antiazul ( $\bar{r}$ ) para los antiquarks. También se formula la hipótesis de que los estados hadrónicos no tienen color neto: cada barión es una combinación de tres quarks de colores diferentes ( $r, v, a$ ), y cada mesón es una combinación de quarks y antiquarks con color y anticolor complementarios ( $r, \bar{r}$ ), ( $v, \bar{v}$ ), ( $a, \bar{a}$ ). Los estados de color deben ser complementarios a los estados de los otros grados de libertad

para ser compatibles con el Principio de Exclusión de Pauli.

En este punto, es importante distinguir entre los grados de libertad de espín isotópico y extrañeza, a los que se denominó como sabores, y el nuevo grado de libertad de color. El grupo  $SU(3)_s$  utilizado por Gell-Mann y Ne'eman está asociado a los tres sabores. En las interacciones fuertes estos sabores se conservan, pero no en las interacciones débiles.

La suposición de tres colores permite usar el mismo grupo  $SU(3)_c$  en la llamada Cromodinámica Cuántica (QCD) como una teoría invariante de norma para los quarks y sus interacciones dentro de los hadrones. Gross, Wilczek y Politzer iniciaron el desarrollo de esta teoría desde principios de los setenta.

La interacción quark-quark es diferente de la interacción nucleón-nucleón, en términos de sus alcances respectivos: infinito para la primera y finito para la segunda. Efectivamente, los experimentos de colisiones de hadrones, dentro de los cuáles ocurren las interacciones quark-quark llevaron a la identificación del alcance infinito de las mismas, y sus comportamientos en los extremos de pequeñas separaciones a altas energías y de grandes separaciones a bajas energías, caracterizados por las descripciones denominadas *libertad asintótica* y *esclavitud infrarroja*, respectivamente. En la primera situación los quarks interactúan como si fueran partículas libres para separaciones pequeñas y la fuerza entre ellos es nula. Para separaciones crecientes la fuerza crece, y para grandes separaciones asegura el confinamiento de los quarks dentro de los hadrones. La comparación con la interacción electromagnética permite reconocer el alcance infinito común de ambas. La diferencia entre ellos se manifiesta en que el vacío electromagnético tiene un comportamiento dieléctrico cuya polarización se traduce en el apantallamiento de la carga eléctrica. En contraste, el vacío hadrónico tiene un comportamiento tipo paramagnético que se traduce en un antiapantallamiento o intensificación de la carga de color con el aumento de la distancia. En consecuencia, la fuerza eléctrica tiende a cero al infinito, pero la fuerza de color se intensifica a mayores separaciones. El alcance infinito de las interacciones electromagnética y entre los quarks tienen asociadas bosones intermediarios con masa nula. Los últimos se llaman *gluones* y transforman el color de un quark en otro:  $|r\rangle \langle \bar{r}|$ ,  $|r\rangle \langle \bar{v}|$ ,  $|r\rangle \langle \bar{a}|$ ,  $|v\rangle \langle \bar{r}|$ ,  $|v\rangle \langle \bar{v}|$ ,  $|v\rangle \langle \bar{a}|$ ,  $|a\rangle \langle \bar{r}|$ ,  $|a\rangle \langle \bar{v}|$ ,  $|a\rangle \langle \bar{a}|$  en notación de kets y bras.

En 1974 se descubrió una partícula que Richter llamó  $\psi$  y Ting  $J$  ( $I^P = 1^-, 3$  100 MeV) y que se identificó como un mesón con la composición  $c\bar{c}$ , confirmando la existencia del cuarto quark  $c$  con carga  $-2/3$  y su antipartícula  $\bar{c}$  con carga  $2/3$ , anticipado por Glashow. En los años siguientes se

produjeron también sus compañeros con encanto explícito  $D^+(c\bar{d}), D^0(c\bar{u}), \bar{D}^0(\bar{c}u), D^-(\bar{c}d), F^+(c\bar{s}), F^-(\bar{c}s)$ . De esta manera se confirmó la existencia de dos generaciones de quarks ( $d, u$ ) y ( $s, c$ ) y sus análogos de leptones ( $e^-, \nu_e$ ), ( $\mu^-, \nu_\mu$ ).

Inesperadamente, en 1975 Perl descubrió otro leptón con espín 1/2 y masa casi doble de la del protón, en dos estados de carga y al que llamó tauón,  $\tau^-$  y  $\tau^+$ , análogos a  $e^-$  y  $e^+$ , y  $\mu^-$  y  $\mu^+$ . La analogía de dobletes de leptones sugirió la existencia de neutrinos de tipo  $\tau$ , ( $\tau^-, \nu_\tau$ ) y ( $\tau^+, \bar{\nu}_\tau$ ), las cuales se confirmaron diez años más tarde en los decaimientos  $W^- \rightarrow \tau^- + \bar{\nu}_\tau$  y  $W^+ \rightarrow \tau^+ + \nu_\tau$ . Adicionalmente, la analogía de dobletes de leptones y quarks en las dos primeras generaciones sugirió la existencia de la tercera generación de quarks ( $b, t$ ) y ( $\bar{b}, \bar{t}$ ) con los nombres de bottom y top. El bottonium ( $b, \bar{b}$ ) se produjo en la misma década junto con sus compañeros ( $b\bar{q}$ ), con  $q = u, d, s, c$  de bottom al descubierto. El toponium ( $t\bar{t}$ ) se produjo dos décadas más tarde en FermiLab, y también sus compañeros ( $t, \bar{q}$ ) incluyendo  $q = b$ . La partícula de Higgs se detectó en CERN en la segunda década del presente siglo.

Los descubrimientos sucesivos de la historia relatada fueron reconocidos en los años subsecuentes.

Burton Richter y Samuel Chao Chung Ting obtuvieron el Premio Nobel de Física en 1976 *por sus trabajos pioneros en el descubrimiento de una partícula elemental pesada de un nuevo tipo*.

Leon M. Lederman, Melvin Schwartz y Jack Steinberg obtuvieron el Premio Nobel de Física en 1988 *por el método de rayos de neutrinos y la demostración de la estructura de doblete de los leptones a través del descubrimiento del neutrino del muón*.

Martin L. Perl obtuvo el Premio Nobel de Física en 1995 *por el descubrimiento del leptón tau*, en conjunto con Frederick Reines *por la detección del neutrino*.

Gerardus t'Hooft y Martinus J.G. Veltman obtuvieron el Premio Nobel de Física en 1999 *por elucidar la estructura cuántica de las interacciones electrodébiles*, y la renormalización de las mismas y de la Cromodinámica Cuántica.

David J. Gross, H. David Politzer y Franck Wilczek obtuvieron el Premio Nobel de Física en 2004 *por el descubrimiento de la libertad asintótica en la teoría de la interacción fuerte*.

El Premio Nobel de Física de 2013 fue otorgado a François Englert y Peter W. Higgs *por el descubrimiento teórico de un mecanismo que contribuye a nuestro entendimiento del origen de la masa de las partículas subatómicas, recientemente confirmado, a través del descubrimiento de la partícula fundamental*

*predicha, por los experimentos ATLAS y CMS en el Gran Colisionador de Hadrones del CERN.*

El Modelo Estándar de las partículas elementales es descrito por teorías de Norma de Yang-Mills basadas en los grupos  $SU(2)_W \otimes U(1)_{em}$  para las interacciones electrodébiles con rompimiento de simetría, y  $SU(3)_c$  para las interacciones fuertes con gluones intermediarios de masa nula.

También ha habido propuestas de teorías de gran unificación de las interacciones fuertes, eléctricas y débiles. Una de ellas, por Glashow y Georgi, basada en el grupo  $SU(5) \supset SU(3)_c \otimes SU(2)_W \otimes U(1)_{em}$  incorpora transformaciones entre quarks y leptones, con la predicción del decaimiento del protón. Los intentos de detección de tal decaimiento en los 80 y 90 fueron infructuosos.

Las teorías de campo cuánticas invariantes bajo transformaciones de norma también se han desarrollado en conexión con los fenómenos cuánticos macroscópicos como la superfluidez y la superconductividad, incluyendo también efectos de rompimiento de simetría.

PARA SABER MÁS:

- [\*All Nobel Prizes in Physics.\*](#)
- Ley-Koo, E., *El electrón centenario*, La ciencia para todos, **165**, Fondo de Cultura Económica, México, 1999.

## FÍSICA MÁS ALLÁ DEL MODELO ESTÁNDAR

*Myriam Mondragón\**

**El Modelo Estándar de las partículas elementales es tremendamente exitoso para describir las partículas e interacciones que consideramos elementales. Sin embargo, deja muchas preguntas sin contestar y presenta problemas técnicos que nos indican que es el límite de bajas energías de una teoría más fundamental. Ha habido muchos intentos tanto teóricos como experimentales de formular esta teoría. Presentamos aquí algunos de los más estudiados y su motivación.**

¿De qué está hecha la materia? ¿Qué la mantiene unida? ¿Fue siempre el Universo como ahora? ¿Cómo podemos saberlo? La física de altas energías busca responder estas y muchas otras, preguntas. Mediante una retroalimentación entre teoría y experimento esta búsqueda llegó a lo que se conoce como el Modelo Estándar (ME) de las partículas elementales. Describe a lo que hasta ahora conocemos como los bloques fundamentales de la materia, las partículas elementales, y describe también las interacciones entre las mismas. La formulación matemática que usa es la teoría cuántica del campo, que además de incluir a la relatividad y la mecánica cuántica, describe también la creación, aniquilación y decaimiento de partículas. El Modelo Estándar de las partículas elementales está basado en simetrías, las más fundamentales son la invariancia de Lorentz y la invariancia bajo las simetrías de norma. Esta última está descrita por los grupos de norma  $SU(3)$ , la cual describe a la fuerza fuerte que mantiene a los quarks confinados en el núcleo, la fuerza débil, responsable del decaimiento de las partículas es descrita por  $SU(2)$ , y la fuerza electromagnética es descrita por el grupo  $U(1)$ . Así, el grupo de norma del ME es  $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ . La fuerza gravitacional no está incluida en el ME porque no se ha formulado hasta ahora una teoría cuántica de la gravedad que sea renormalizable. Esto no

---

\*Departamento de Física Teórica, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.



no puede contestar de primeros principios. Entre estas se encuentran: ¿Por qué son las masas de las partículas elementales tan diferentes? ¿Por qué hay más materia que anti-materia en nuestro Universo? ¿Cuál es la naturaleza del bosón de Higgs, es fundamental, hay más de uno? ¿Por qué hay sólo tres generaciones de materia? ¿Los neutrinos son sus propias anti-partículas, i. e. son partículas de Majorana? ¿Qué es la materia oscura? ¿Qué estabiliza la masa del bosón de Higgs (problema de la jerarquía)?

Para dar respuesta a estas preguntas y muchas más necesitamos ir a una teoría más fundamental, cuyo límite de baja energía sea el ME. Esto estaría en analogía con la relatividad, que es la teoría más fundamental, cuyo límite de baja velocidad es la mecánica de Newton. Al conjunto de teorías o modelos que extienden el ME hacia una teoría más fundamental se le conoce como física más allá del ME, o BSM por sus siglas en inglés.

Añadir simetrías, partículas, interacciones e incluso dimensiones espacio-temporales extra son las principales maneras de extender el ME, por supuesto combinaciones de todas estas posibilidades también son válidas. De hecho, a menudo extender el ME de una manera conlleva extensiones en otros sectores. Hasta ahora no hay una sólo extensión del ME que pueda explicar simultáneamente todas las incógnitas, por lo que los modelos se construyen con más de una suposición extra. Para saber cuál será la dirección a seguir, igual que en el ME, se necesita una colaboración estrecha entre teoría y experimento. Además, en la búsqueda de física BSM entran también las observaciones astrofísicas y cosmológicas debido a que muchas extensiones del ME se encuentran formuladas a muy altas energías que son inaccesibles en los laboratorios terrestres, pero sí lo son en procesos astrofísicos.

Aquí nos vamos a concentrar solamente en algunas de las extensiones más estudiadas del ME, explicando la motivación para formularlas y sus posibles predicciones.

#### AÑADIR SIMETRÍAS, INTERACCIONES Y/O PARTÍCULAS

¿Cómo vamos al más allá? La manera más directa de extender el ME es añadiendo más partículas, pero preservando el grupo de simetría de norma. Después del descubrimiento de la masa de los neutrinos, lo más inmediato es añadir neutrinos derechos para generar los términos de masa de los mismos. Se puede dar masa a los neutrinos de la misma manera que a las otras partículas del ME, mediante un término de Yukawa, es decir el acoplamiento del bosón de Higgs con un fermión de Dirac. El problema es que

el acoplamiento de Yukawa debe ser pequeñísimo comparado con el de las otras partículas, lo cual lo hace anti-natural. Una manera de atenuar este problema es suponer que los neutrinos derechos (o estériles) están a una escala de energía muy alta, al diagonalizar la matriz de masas queda un eigenvalor (la masa de la partícula) muy pesado y uno muy ligero. Por esta razón se le conoce como mecanismo del subibaja y hay diferentes maneras de implementarlo.

Se pueden añadir también bosones escalares complejos, es decir más bosones de Higgs. Los modelos de dos dobletes de Higgs han sido ampliamente estudiados. Estos modelos predicen la existencia de cinco bosones escalares masivos después del rompimiento de la simetría electrodébil. Uno ligero, como el del ME, uno neutro, dos cargados con cargas opuestas y un pseudoescalar. El descubrimiento de cualquiera de estos bosones exóticos será una señal clara de nueva física.

Por otro lado, una manera muy exitosa de encontrar relaciones entre diferentes parámetros o cantidades en una teoría es relacionarlos mediante una simetría. Generalmente la adición de simetrías implica nuevas partículas y/o interacciones. Esto permite hacer predicciones que pueden ser probadas experimentalmente para guiarnos en la dirección correcta.

#### Teorías de Gran Unificación

Hay diversas maneras de añadir simetrías para extender el ME. Una posibilidad es agrandar el grupo de norma para que incluya a todas las interacciones fundamentales (excepto la gravedad) en una sola. Estas son las teorías de Gran Unificación o GUTs por sus siglas en inglés, que están formuladas a muy altas energías donde se supone que la fuerza electrodébil y la fuerte se unifican en una sola. Es decir, la fuerza electromagnética, débil y fuerte son en realidad diferentes manifestaciones de una misma interacción fundamental. Las GUTs, además de ser matemáticamente interesantes, surgen también de la observación de que si extrapolamos los valores de las constantes de acoplamiento de norma del grupo del ME  $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$  a altas energías éstas tienden a un valor similar. Si suponemos que no hay física más allá del ME entre las escalas de energía y la escala GUT, esta unificación no es muy buena, pero el valor de las constantes de acoplamiento ciertamente es mucho más parecido que en el ME a bajas energías.

Las teorías GUT más estudiadas son las que tienen grupo de norma  $SU(5)$  y  $SO(10)$ , que son los grupos de norma más pequeños que acomodan al ME. Reducen el número de parámetros del ME, ya que a altas energías



sólo hay un acoplamiento de norma. Pueden explicar la carga fraccionaria de los quarks y dar un valor aproximado para el ángulo de Weinberg. El mecanismo de subibaja para generar las masas de los neutrinos ligeros es también compatible con una hipótesis de Gran Unificación. Por otro lado las GUTs predicen partículas nuevas y exóticas que tienen cargas tanto de color como electrodébiles y por lo tanto se les conoce como leptoquarks, cuya masa es del orden de la escala de energía a la que se realizan las GUTs, i. e.  $\sim 10^{16}$  GeV. Estos leptoquarks pueden mediar el decaimiento del protón con una vida media que, en el caso de que no haya física nueva entre el ME y la GUT, ya debiera haber sido observado experimentalmente.

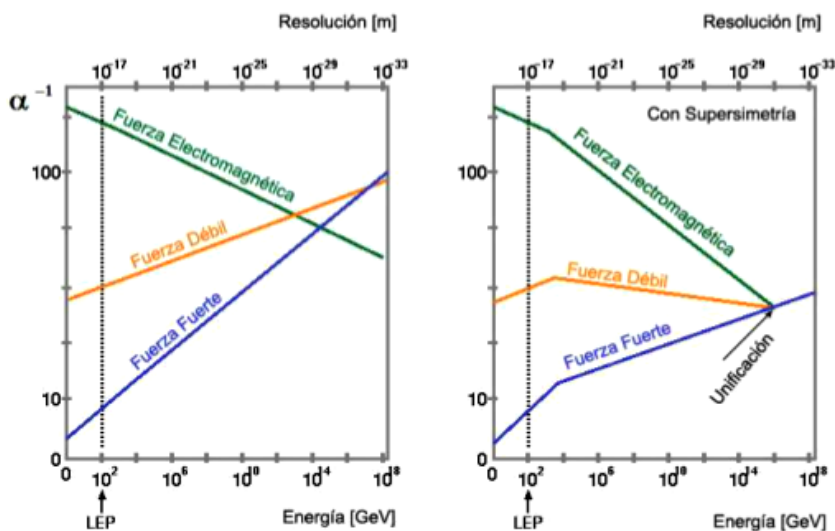
### Supersimetría

Otra simetría que ha sido muy estudiada como extensión del ME es la supersimetría o SUSY. Esta es una simetría espacio-temporal que relaciona bosones y fermiones. Es la única simetría que puede mezclar las simetrías internas y espacio-temporales de manera no trivial. Es decir, conecta cantidades como el espín, que son de la mecánica cuántica, con cantidades macroscópicas como el espacio-tiempo. La supersimetría provee de una solución natural al problema de la jerarquía en el ME, si se realiza a energías no muy lejanas a la escala electrodébil, del orden de unos pocos TeV. El problema de la jerarquía se refiere a la diferencia de escalas entre la escala de Planck, considerada la escala fundamental, que es del orden de  $10^{19}$  GeV y la escala electrodébil del orden de 100 GeV. La masa del Higgs es  $\sim 125$  GeV, pero las correcciones cuánticas (radiativas) en principio la “empujarían” a un valor cercano a la masa de Planck. Esto se debe a que en las partículas escalares, como el Higgs, las correcciones radiativas tienen una dependencia cuadrática con la escala de energía.

En supersimetría las correcciones cuánticas a la masa del Higgs provenientes de las partículas del ME y sus super-compañeros se cancelan exactamente debido a que contribuyen con signos opuestos. Esto da una solución natural al problema de la jerarquía y es una de las principales motivaciones para estudiar modelos supersimétricos. Por otro lado, las teorías del campo supersimétricas tienen mejores propiedades analíticas que el ME. Incluye un compañero supersimétrico para cada campo del ME. Es decir, para cada fermión existe un bosón y viceversa. Tenemos así electrón y s-electrón, gluon y gluino, Higgs y Higgsino, W y Wino, etc. Para ser una teoría matemáticamente consistente (libre de anomalías de norma), se necesita además añadir otro escalar complejo de Higgs, doblete de  $SU(2)$ . Después del rompimiento de la simetría electrodébil cuando las partículas adquieren masa,

hay cinco bosones de Higgs, análogo a modelos de dos dobletes sin SUSY. Entre estos escalares hay uno neutro ligero  $h$ , que asociamos con el Higgs del ME, uno neutro pesado  $H$ , dos cargados pesados  $H^\pm$  y un pseudoescalar pesado  $A$ . La supersimetría, si existe, es una simetría rota, dado que no observamos a estos compañeros supersimétricos. Suponemos que la escala de rompimiento de SUSY no es muy lejana a la escala del rompimiento electrodébil para poder dar solución al problema de la jerarquía, pero qué es “no muy lejana” depende de la interpretación. En general se supone que es de unos pocos TeV.

Por otro lado, la supersimetría tiene otras cualidades que la han hecho ser estudiada ampliamente. Las teorías GUT con supersimetría (SUSY-GUT) se unifican con mucho mayor precisión que en el ME. Algunos de los super-compañeros son buenos candidatos a materia oscura. En este sentido ha sido especialmente estudiado el neutralino más ligero, que es la partícula SUSY más ligera y que no decae. Además del neutralino otros candidatos SUSY para materia oscura son el s-neutrino y el axino.



**Figura 46.2:** Valor del inverso de los acoplamientos  $\alpha^{-1}$  a altas energías en el ME (izquierda) y con supersimetría (derecha).

Hay diversos modelos supersimétricos y muchas variaciones del MSSM (extensión mínima del ME que incluye supersimetría). Sólo algunas de estas han sido probadas experimentalmente en el LHC. Una posibilidad es que

SUSY pudiera estar a escalas de energía un poco más allá del alcance del LHC, unos pocos TeV, en cuyo caso estaría fuera de nuestro alcance experimental por varios años. Las partículas SUSY con carga de color serían las que se podrían observar primero en el LHC. Las partículas que interactúan sólo mediante la fuerza electrodébil, como charginos y neutralinos, tienen una sección eficaz de producción mucho menor, es decir son producidas en mucho menor cantidad. Esto dificulta su posible descubrimiento. Por esta razón los modelos SUSY que predicen partículas pesadas con carga de color y partículas con interacciones sólo electrodébiles menos pesadas son mucho más difíciles de descubrir.

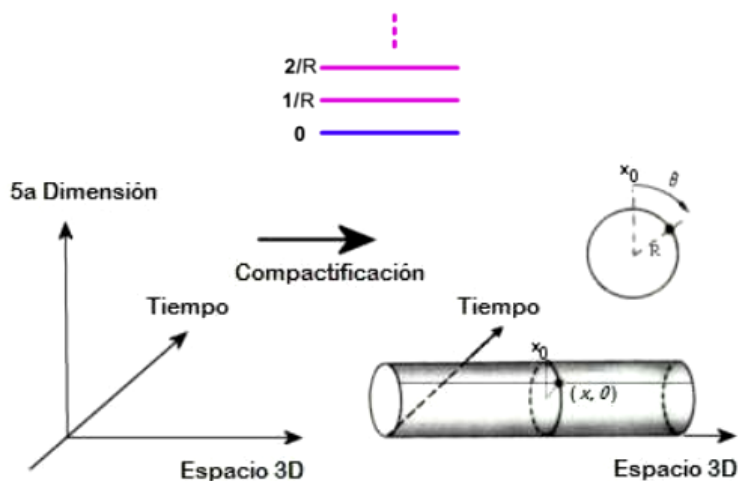
Aunque no hay evidencias experimentales de SUSY a bajas energías, la búsqueda de este tipo de teorías continuará, dado que provee soluciones a varios problemas del ME con una sola hipótesis. Hasta el momento una de las mejores soluciones para el problema de la jerarquía es la suposición de compañeros supersimétricos. Sin embargo, la Naturaleza podría tenernos sorpresas y algún mecanismo desconocido hasta ahora es el responsable de estabilizar la masa del bosón de Higgs. Encontrar evidencias experimentales de más de un bosón de Higgs sería una motivación fuerte para continuar la búsqueda de supersimetría y de extensiones del ME con sectores extendidos de Higgs sin SUSY.

#### AÑADIMOS DIMENSIONES ESPACIO-TEMPORALES

Una manera diferente de extender el ME es añadir más dimensiones espaciales. Esta idea precede al ME por muchos años, fue propuesta por T. Kaluza y O. Klein (1919 y 1926). La idea original es que la interacción gravitatoria y la electromagnética se unifican en una dimensión espacio-temporal extra, de esta manera se puede describir tanto a la gravedad como al electromagnetismo. Esta dimensión extra no es extendida, como las tres espaciales que conocemos, sino que está enrollada o compactificada. En su versión original la teoría de Kaluza-Klein presenta muchos problemas, por lo que no es una buena descripción de la Naturaleza. Sin embargo, ha sido la base para muchas de las extensiones modernas del ME, como la teoría de supercuerdas y las branas.

La manera más simple de visualizar una dimensión espacial extra es pensar en un cilindro, en el cual el largo del cilindro es la dimensión extendida y la dimensión radial es compacta. Al escribir la teoría en 5 dimensiones e imponer que la quinta dimensión sea compacta, es decir,  $x_5 = R\phi$ , la acción se puede reescribir como una teoría en cuatro dimensiones con

una torre infinita de estados masivos cuya masa es  $m_n = m^2/R^2$ . Estas partículas se conocen como estados de Kaluza-Klein y son una de las señales de una dimensión extra compacta. Existen versiones modernas más complicadas de las teorías de Kaluza-Klein, como son las de dimensiones universales extra. Estas teorías dan candidatos a materia oscura pesada y a posibles señales en el LHC.



**Figura 46.3:** Compactificación de una dimensión extra en un círculo y los estados de Kaluza-Klein asociados a la misma.

Las teorías de supercuerdas representan uno de los intentos de unificar las cuatro interacciones fundamentales, es decir incluyendo la gravedad. En analogía con las teorías de Kaluza-Klein, las teorías de supercuerdas necesitan de dimensiones extra, además de supersimetría, para ser matemáticamente consistentes. Para poder conectarlas con el mundo cuadrimensional en el que vivimos hay que compactificar estas dimensiones extra, de manera similar a lo que se hizo en las teorías de Kaluza-Klein. El problema de entender estas teorías a más bajas energías se convierte entonces en un problema geométrico de entender el espacio extra-dimensional en el que viven las cuerdas y de como llevar a cabo la compactificación de las dimensiones extra, para llegar a una teoría en cuatro dimensiones espacio-temporales.

Un aspecto muy interesante de la teoría de cuerdas es la llamada “dualidad”. Al compactificar diferentes teorías de cuerdas de manera distinta se puede obtener la misma física. Antes de que se descubriera la dualidad se

pensaba que habían cinco teorías distintas de cuerdas, pero resulta que son equivalentes las unas a las otras mediante las transformaciones de dualidad; son además el límite de una teoría más fundamental llamada teoría M. Por medio de las dualidades se pueden conectar teorías en diferentes regímenes, por ejemplo una teoría con acoplamiento fuerte con una con acoplamiento débil. Esto ha resultado útil para entender aspectos de teorías fuertemente acopladas, en las cuales no se pueden hacer cálculos en teoría de perturbaciones, pero se pueden hacer en la teoría dual, débilmente acoplada. Una de las dualidades más estudiada es la llamada correspondencia AdS/CFT, o dualidad gravedad/norma, donde por un lado se tiene una teoría del campo conforme que es dual a una teoría en un espacio anti-de Sitter formulada como una teoría de cuerdas o de gravedad cuántica. Estos desarrollos han llevado a estudiar con más detalle este tipo de teorías con la esperanza de obtener tanto información de teorías fuertemente acopladas como QCD, como de posibles teorías de gravedad cuántica. Hasta la fecha no se tiene una teoría dual que en el lado de teoría del campo corresponda al Modelo Estándar.

#### ASTROPARTÍCULAS

La masa de los neutrinos y la evidencia de materia oscura son las primeras evidencias que tenemos de física más allá del Modelo Estándar. La necesidad de ir más allá del Modelo Estándar está bien fundamentada también desde el punto de vista teórico. No hemos encontrado hasta ahora una teoría que de respuesta a todas las interrogantes, ni más evidencia de nueva física, pero existe una intensa búsqueda, que cubre tanto los aspectos teóricos como los experimentales. Debido a que las extensiones del ME necesariamente tienen consecuencias en la cosmología y en algunos aspectos de la astrofísica, la búsqueda debe continuar con una continua colaboración y retroalimentación en las tres áreas. Esto ha impulsado el desarrollo de la física de astropartículas, que estudia la interconexión de estas tres disciplinas, por ejemplo en temas como la abundancia de materia sobre anti-materia, la naturaleza de la materia oscura, procesos astrofísicos donde interviene la naturaleza de los neutrinos, como la explosión de una supernova, el origen y composición de los rayos cósmicos, entre muchos otros.

La búsqueda continúa y la retroalimentación entre teoría y experimento, entre física de partículas elementales, astrofísica y cosmología, nos irá guiando en la dirección correcta en nuestra aventura [1-7].

## GLOSARIO

- **Helicidad y quiralidad:** La helicidad de una partícula es la proyección del espín en la dirección de movimiento, si es positiva se dice que es derecha, si negativa se dice que es izquierda. La helicidad de las partículas masivas depende del marco de referencia.

Se dice que un objeto es quiral si no puede ser sobrepuesto con su imagen especular. Las partículas elementales son quirales. Para un fermión de Dirac el operador de quiralidad es  $\gamma^5$  cuyos eigenvalores son  $\pm 1$ . Al actuar sobre la partícula con los operadores de proyección  $P_{R,L} = \frac{1 \pm \gamma^5}{2}$  se puede expresar en sus componentes derecha e izquierda. La quiralidad es una propiedad intrínseca de la partícula, no depende del marco de referencia. La quiralidad y la helicidad coinciden para partículas sin masa.

- **Renormalización:** Es el procedimiento por el cual partes divergentes de un cálculo se absorben en la redefinición de algunas cantidades observables para dar resultados finitos. Una teoría renormalizable se puede desarrollar en teoría de perturbaciones con términos finitos.
- **Tipos de partículas:** Bosones, espín entero, estadística de Bose-Einstein. Si tienen espín 0 son escalares, si tienen espín 1 son vectoriales. Fermiones, espín semi-entero, estadística de Fermi-Dirac.

## REFERENCIAS

- [1] D. Goldberg, *The Standard Model in a Nutshell*. Princeton ; Oxford: Princeton University Press, feb. de 2017.
- [2] P. Langacker, *The Standard Model and Beyond*, 1 edition. Boca Raton, FL: CRC Press, dic. de 2009.
- [3] Y. Nagashima, *Beyond the Standard Model of Elementary Particle Physics*, 1 edition. Weinheim: Wiley-VCH, jun. de 2014.
- [4] I. Aitchison, *Supersymmetry in Particle Physics: AN Elementary Introduction*, 1 edition. Cambridge; New York: Cambridge University Press, oct. de 2007.
- [5] S. Krippendorf, F. Quevedo y O. Schlotterer, «Cambridge Lectures on Supersymmetry and Extra Dimensions», *ArXiv:1011.1491 [hep-ph, physics:hep-th]*, nov. de 2010.

- [6] R. N. Mohapatra, *Unification and Supersymmetry: THE Frontiers of Quark-Lepton Physics*, 2.<sup>a</sup> ed., ép. Graduate Texts in Contemporary Physics. New York: Springer-Verlag, 1992.
- [7] C. Grupen, *Astroparticle Physics*, 2.<sup>a</sup> ed., ép. Undergraduate Texts in Physics. Springer International Publishing, 2020.

⊙ *Página intencionalmente en blanco* ⊙