

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA, FÍSICA Y COMPUTACIÓN

SERIE “C”

TRABAJOS DE FÍSICA

N.º 13/2019

ELEMENTOS DE LA FÍSICA CONTEMPORÁNEA

Sergio A. Cannas – Ricardo C. Zamar



Editor: Miguel Chesta

CIUDAD UNIVERSITARIA – 5000 CÓRDOBA

REPÚBLICA ARGENTINA

SERGIO A. CANNAS - RICARDO C. ZAMAR

Elementos de la Física Contemporánea

FaMAF-UNC

PROLOGO

Estas notas surgieron como material de soporte para la materia *Física Contemporánea*, de la Licenciatura en Física, de la Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación (FaMAF), Universidad Nacional de Córdoba (UNC), Argentina. El programa abarca un conjunto amplio de temas, donde cada ítem se refiere a un área o campo de la física actual. Este hecho da a la materia una naturaleza ecléctica, por lo que resulta difícil encontrar un único texto que cubra una parte importante de los contenidos, y con el enfoque requerido. Debido a la gran diversidad de temas que es necesario abordar para aproximarse a la frontera actual de la física, en muchos casos la estrategia consistió en la selección de “puntos nodales” que contienen, en nuestra opinión, herramientas fundamentales que permiten la posterior profundización por parte del lector.

El presente trabajo reconoce su origen y motivación en las notas de clase que elaboramos durante la implementación por vez primera de la materia en el año 2013. La versión original fue posteriormente depurada durante el dictado de la materia del 2014 al 2017. No todos los temas de la materia se encuentran incluidos en estas notas, ya que algunos de ellos (Física Nuclear), se encuentran descriptos al nivel requerido por la materia en numerosos textos de Física Moderna.

Una obra de esta naturaleza sería muy difícil de elaborar sin la colaboración y el asesoramiento de numerosos colegas. Queremos agradecer principalmente a Cecilia González, Verónica Marconi, Carlos Kozameh y muy especialmente al querido Sergio Daín, quien falleció durante el 2016. Sirva pues la presente obra también como un humilde homenaje a su memoria.

A continuación brindamos una breve descripción de los objetivos de cada tema aquí tratado.

Moléculas: esta sección presenta una introducción al estudio de la naturaleza de la estructura molecular desde el punto de vista físico, mediante el análisis de los diferentes procesos capaces de ensamblar un conjunto de núcleos y electrones para formar una estructura estable. En cierta forma, es un paso natural luego del estudio de átomos multielectrónicos que se aborda en los cursos de Mecánica Cuántica. Por razones de simplicidad, nos restringimos al caso de moléculas diatómicas. El enfoque principal está en el estudio del origen de la ligadura molecular en base a los principios de la mecánica cuántica, discutiendo la teoría de Heitler-London como el punto de partida de la teoría de la covalencia. El estado del arte en el campo de la química

actual incluye además de estos conceptos, una metodología alternativa para el cálculo de estructuras moleculares, conocida globalmente como método de combinación de orbitales moleculares (LCAO). La literatura actual de la físico-química sigue de manera preponderante dicho enfoque, razón por la cual incluimos en este capítulo una descripción sintética de los conceptos en que se basa LCAO, y la comparación con la covalencia. El movimiento de los núcleos atómicos en el potencial molecular provisto por la dinámica electrónica es abordado "de menor a mayor", en el marco de la hipótesis de Born-Openheimer asumiendo en primera instancia la separación de las rotaciones y vibraciones como movimientos independientes, como aproximación de orden cero en un esquema perturbativo. Luego analizamos las primeras correcciones que surgen de incluir la anarmonicidad y el acople entre ambos tipos de movimiento. En particular, discutimos la estrategia histórica en base al potencial de Morse. Finalmente, estudiamos las reglas de selección para las transiciones dipolares eléctricas y las características principales de los espectros.

Superconductividad: El objetivo de esta parte es brindar una descripción general de la fenomenología asociada a la superconductividad. Así, los aspectos teóricos se introducen a través de las teorías fenomenológicas de London y Landau-Ginzburg, mediante las cuales se introducen los conceptos básicos de longitud de penetración y coherencia, culminando en una descripción general de los superconductores tipo II y una breve descripción del efecto Josephson. La teoría BCS no se discute en este contexto y solo se la menciona al pasar.

La **información cuántica** es un tema de gran actualidad en la física, que abarca desde el aspecto básico de los fundamentos de la mecánica cuántica hasta las aplicaciones contemporáneas en 'tecnologías cuánticas'. En este capítulo utilizamos la antigua controversia conocida como paradoja o argumento de EPR para resaltar la naturaleza de los principios de la mecánica cuántica, que contrastan con algunos preceptos en que se basa la descripción del mundo clásico, como los de localidad y realidad. Se introduce el formalismo de operador densidad, como un lenguaje adecuado para presentar conceptos clave en el amplio campo de la información cuántica, como coherencia, correlaciones, entrelazamiento y no-localidad cuánticos, así como la noción de no-separabilidad de sistemas cuánticos acoplados por una interacción mutua. En ese contexto se presenta la desigualdad de Bell, como un criterio cuantitativo, contrastable experimentalmente, para caracterizar a la teoría cuántica. Para ilustrar estas ideas utilizamos un ejemplo (introducido por K. Blum en la tercera edición de su monografía *Density Matrix Theory and Applications*) basado en un sistema bipartito puro, mediante el cual se puede discutir el concepto de entrelazamiento cuántico de una manera directa. El concepto de no separabilidad, central en la discusión de EPR, también es presentado desde el punto de vista de los procesos dinámicos

irreversibles que ocurren en sistemas cuánticos abiertos. En ese contexto se ilustra la discusión mediante un resumen del modelo espín-bosón que describe la dinámica decoherente de un qubit en presencia de un campo de fotones.

Relatividad General y Cosmología: El objetivo de esta sección es brindar al lector conocimientos básicos que permitan entender la naturaleza de la Teoría de la Relatividad General. A tal fin, se brinda una breve introducción a la geometría diferencial y una discusión relativamente extensa del principio de equivalencia. De esta manera, se busca enfatizar el carácter geométrico de la teoría y las motivaciones que llevaron a su formulación. Las ecuaciones de Einstein se mencionan, pero no se analizan, ya que no está entre los objetivos que el estudiante aprenda a resolver problemas de relatividad. Asumiendo entonces que la métrica del espacio-tiempo viene dada como solución de las ecuaciones de Einstein, la obtención de la trayectoria de partículas puntuales se presenta mediante un principio variacional, del cual resulta la ecuación de la geodésica. Esto permite analizar la aplicación de la teoría en algunos ejemplos relativamente simples, tales como la precesión del perihelio de Mercurio y los agujeros negros esféricos (métrica de Schwarzschild). Finalmente, se analizan algunos de los modelos cosmológicos más utilizados y su consecuencia principal, el big bang.

Partículas y Campos: el objetivo de esta parte es brindar a los lectores algunas nociones básicas que le permitan comprender como se estructura una teoría cuántica de campos. Se analiza la cuantización del campo electromagnético y algunos conceptos básicos del tratamiento de la interacción entre radiación y materia, en parte como soporte para el tratamiento posterior de laser. Finalmente, se da una introducción a la mecánica cuántica relativista, a través de la teoría de Dirac, culminando en su predicción más importante: la existencia de antimateria (positrón). Se espera que estos conceptos sirvan de base para asimilar mínimamente una descripción cualitativa del modelo standard.

Laser: con el objetivo de contribuir al entendimiento de los aspectos básicos del funcionamiento del laser, en este capítulo se analizan dos temas básicos relacionados con la interacción de la radiación con un átomo. Estos son: los procesos de radiación estimulada y espontánea, y la existencia de los estados estacionarios que el sistema de átomos puede alcanzar aún en contacto con radiación externa aplicada. La existencia de transiciones estimuladas y espontáneas se discute a través de la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo que permite mostrar la existencia de ambos tipos de procesos en la escala de tiempo de validez de la teoría. El aspecto novedoso en este punto es la presencia de transiciones electrónicas que ocurren aun en ausencia absoluta de fotones del campo circundante al átomo, lo que señala a las *fluctuaciones del vacío* como un mecanismo microscópico esencial, responsable del comportamiento macroscópico del sistema átomo-radiación. Para introducir

los procesos atómicos de absorción y emisión de energía electromagnética en condiciones estacionarias, hacemos uso de la ecuación maestra markoviana, que permite tratar de manera conjunta las fluctuaciones del vacío como proceso intrínseco que origina disipación y decoherencia y la radiación externa que origina las transiciones estimuladas. El análisis permite encontrar la relación entre las intensidades de ambos tipos de procesos mediante un análisis de la situación de equilibrio del átomo con radiación térmica. De esta forma es posible rederivar la muy conocida relación histórica entre los *coeficientes de Einstein*. En base a lo anterior se discuten aspectos básicos involucrados en la generación de radiación laser en una cavidad, en la que es posible lograr la excitación en cascada de radiación atómica estimulada como un proceso colectivo, que es capaz de producir luz de gran intensidad, y de muy pequeño ancho de banda. Si bien el tratamiento es preponderantemente semiclassical (átomo cuántico y campo clásico), los elementos de dinámica de la matriz densidad presentada en este capítulo brindan herramientas para el estudio de otros problemas en óptica cuántica, tales como el modelo de Jaynes-Cummings.

Contenidos

I Moléculas	9
1 Estructura Molecular	11
1.1 Introducción	11
1.2 El ión molecular hidrógeno H_2^+ . Ligadura por tuneo de un electrón	13
1.3 Ligadura covalente. La molécula de H_2 . Teoría de Heitler-London.	20
1.4 Enlace iónico.	25
1.5 Enlace mixto iónico-covalente	29
1.6 Interacción de Van der Waals	30
1.7 Método de combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO)	32
1.8 Síntesis del método de campo consistente en moléculas (SCF-MO) .	37
2 Energías de Moléculas Diatómicas. Espectros rotacionales y vibracionales	43
2.1 Reglas de selección	49
2.2 Apéndice	56
2.3 Bibliografía sugerida	60
II Superconductividad	61
3 Superconductividad	63
3.1 Fenomenología	63
3.2 Termodinámica	66
3.3 Teoría de London	69
3.4 Teoría de Landau-Ginzburg (LG)	73

CONTENIDOS

3.5	Descripción microscópica	79
3.6	Superconductores tipo I y II	81
3.7	Superconductividad de altas temperaturas	86
3.8	Efecto Josephson	87
3.9	Aplicaciones	89
3.9.1	SQUID	89
3.9.2	Transmisión de energía	92
3.9.3	Electroimanes superconductores	93
3.9.4	Levitación magnética	93
3.10	Bibliografía recomendada	94
 III Información Cuántica		95
4	Información Cuántica	97
4.1	Introducción	97
4.1.1	Argumento de Einstein, Podolsky y Rosen (EPR)	100
4.2	Estados cuánticos puros y mezclas estadísticas	103
4.2.1	Operador densidad (matriz densidad). Propiedades básicas	107
4.2.2	Ecuación de Liouville-Von Neumann	108
4.3	No-separabilidad. Entrelazamiento. Decoherencia	109
4.3.1	Matriz densidad reducida	109
4.3.2	Decoherencia	113
4.3.3	Entrelazamiento y correlaciones cuánticas en sistemas bipartitos puros.	117
4.4	Dispersión de haces de partículas con espín 1/2.	119
4.4.1	Matriz densidad de dos partículas y matrices densidad reducidas.	120
4.4.2	Parámetros de correlación. Discusión física	122
4.4.3	Estados con entrelazamiento máximo	128
4.4.4	Entropía del entrelazamiento	130
4.5	Estados de Bell. Correlaciones en el estado singlete	132
4.6	Desigualdades de Bell	135
4.7	Bibliografía recomendada	139
 IV Relatividad General y Cosmología		141
5	Relatividad General	143
5.1	Introducción	143

5.2	Geometrias no euclidianas	144
5.2.1	Geometría euclidiana del plano	146
5.2.2	Geometría no-euclidiana de la esfera	149
5.2.3	Coordenadas e invariancia	154
5.3	Teoría de la Relatividad Especial	155
5.4	Teoría geométrica de la gravedad	163
5.4.1	Teoría de la gravedad de Newton	163
5.4.2	El Principio de Equivalencia	165
5.4.3	Gravedad Newtoniana en términos de espacio-tiempo curvo	173
5.5	Relatividad General	176
5.5.1	Geometría en el entorno de una estrella esférica	181
5.5.2	Agujeros negros y el colapso gravitacional	185
5.6	Bibliografía recomendada	189
6	Nociones de Cosmología	191
6.0.1	Modelos cosmológicos	191
6.1	Bibliografía recomendada	200
V	Partículas y Campos	201
7	Cuantización del Campo Electromagnético: El Fotón	203
7.1	Descomposición espectral del campo electromagnético	203
7.1.1	Campo en términos de variables canónicas	205
7.2	El gas de fotones	207
7.2.1	El oscilador armónico	207
7.2.2	Cuantización del campo electromagnético	209
7.2.3	Fluctuaciones del vacío	213
7.2.4	Estados coherentes	214
7.3	Emisión y absorción de radiación por átomos	217
7.3.1	Interacción dipolar	217
7.3.2	Interacción de un átomo con un campo cuantizado	219
7.4	Bibliografía recomendada	221
8	Teoría de Dirac: El positrón	223
8.1	Ecuación de Dirac	223
8.1.1	Cuantización	224
8.1.2	Ecuación de continuidad	226
8.1.3	Límite no relativista	227
8.1.4	Covariancia, rotaciones y spin	230

CONTENIDOS

8.1.5	Soluciones de partícula libre	235
VI	Laser	239
9	Laser	241
9.1	Introducción	241
9.2	Transiciones electrónicas estimuladas y espontáneas. Coeficientes de Einstein	243
9.3	Ecuación de balance (ecuación maestra)	246
9.4	El fenómeno LASER	252
9.4.1	Propiedades direccionales de los coeficientes de Einstein	252
9.4.2	Excitación óptica de “átomos de dos niveles”	254
9.4.3	Atenuación óptica	257
9.4.4	Inversión de poblaciones. Amplificación óptica	260
9.5	Apéndice	266
9.6	Bibliografía recomendada	268

Parte I

Moléculas

CAPÍTULO 1

ESTRUCTURA MOLECULAR

1.1 Introducción

La química es la disciplina científica que explora el mundo de átomos y moléculas, buscando explicar sus combinaciones, estructuras y propiedades, como así también describir los procesos dinámicos que transforman esas estructuras. Se busca comprender la naturaleza de las interacciones atómicas que originan estructuras moleculares estables y de las fuerzas intermoleculares que dan lugar a estructuras sólidas extendidas. También, se plantea como objetivo fundamental comprender la reactividad química. La mecánica cuántica provee la fundamentación conceptual sobre la cual descansa el conocimiento actual sobre estos fenómenos.

En nuestro estudio nos enfocaremos en el aspecto estructural molecular, introduciéndonos en los métodos de cálculo de las energías involucradas y en el uso de la espectroscopía como una importante herramienta para el desarrollo de los modelos moleculares. En primer lugar abordaremos las ideas teóricas principales basadas en la mecánica cuántica, que históricamente se desarrollaron para explicar el origen y naturaleza de las “fuerzas” que hacen posible la existencia de una estructura multiatómica estable que denominamos molécula. Luego discutiremos las aproximaciones principales que permiten calcular las energías moleculares y finalmente introduciremos los principios de la espectroscopía molecular. De la misma forma que en el estudio de la física atómica, la espectroscopía molecular posibilita el acceso a los espectros energéticos moleculares, y por lo tanto permite la contrastación de los cálculos teóricos basados en la solución de la ecuación de Schrödinger correspondiente al

1.1. INTRODUCCIÓN

modelo propuesto.

El problema teórico que significa la solución de la ecuación de Schrodinger para una molécula, aún de las más simples, es muy complejo, ya que demanda describir la dinámica de un conjunto de electrones y núcleos, en un sistema multi-centro de muchas partículas. Aquí, a diferencia de lo que ocurre en los átomos multi-electrónicos, no solamente importa la dinámica de los electrones sino además debe tenerse en cuenta la dinámica de los núcleos, considerando la repulsión nuclear y electrónica, así como la atracción electrón-núcleo.

Nuestro análisis estará basado en una hipótesis de carácter fundamental, que está presente en la mayoría de los cálculos cuánticos, y que introducirá una simplificación importante en la teoría. Se trata de la llamada *aproximación de Born-Oppenheimer* (BO). Mediante esta hipótesis es posible separar la dinámica de los núcleos y los electrones que participan en la unión molecular o ligadura química, introduciendo así una energía potencial efectiva que gobierna los movimientos de los núcleos en una estructura estable. Toda la discusión se hará en torno a moléculas diatómicas, lo que implica una considerable simplificación de la presentación, permitiendo a la vez incluir las ideas principales. El propósito principal de esta presentación es el de plantear algunas de las ideas fundamentales que subyacen en este universo complejo dentro del reino de la mecánica cuántica, como un apoyo para la introducción en la muy variada literatura sobre el tema.

Cabe notar que aún dentro de la simplificación que introduce la aproximación de BO, la descripción del enlace molecular es un problema arduo. Al tratarse de un problema multi-centro, surge una complicación superior a la que plantean los átomos multielectrónicos. En este último caso, el cálculo de las energías y funciones de onda de los diferentes elementos atómicos puede realizarse mediante una metodología de campo central consistente (Hartree-Fock). En el estudio de la estructura molecular no es posible aplicar directamente este tipo de métodos, aunque en cierto modo algunas estrategias de cálculo “copian” la idea de la construcción de los estados multielectrónicos acomodando electrones a lo largo de una base de funciones. Este procedimiento se conoce como LCAO (combinación lineal de orbitales atómicos), como se verá más adelante.

Para la resolución de los cálculos de la estructura molecular existen en realidad varias estrategias, que en muchos casos cooperan en la solución del problema. Estos métodos están basados en dos ideas principales. Una de ellas ve a la molécula como un arreglo estable de un grupo de núcleos y electrones¹. La estructura exacta la determinan las fuerzas electromagnéticas y las leyes de la mecánica cuántica. El otro enfoque considera la molécula como una

¹En cierta forma esta visión extiende a la molécula la idea de una ‘gran’ estructura atómica.

estructura estable formada por la asociación de dos o más átomos, que retienen su identidad, a diferencia del enfoque anterior. Ambos puntos de vista son útiles en diferentes casos, y en general la estructura y propiedades moleculares se describen mejor con una combinación de ambos enfoques.

Entonces, comenzaremos visualizando la idea de ligadura molecular *covalente*, de origen netamente cuántico, siguiendo el planteo histórico del modelo de Heitler-London para describir la molécula de H_2 . Para ello, partiremos del caso más simple, el ión molecular H_2^+ . En este ejemplo discutiremos las ideas principales del método conocido como *Teoría de Ligadura Covalente* (VBT en inglés, por valence bond theory). Veremos que un ingrediente fundamental para la estabilidad de este sistema es el proceso cuántico de *tunneling*. Luego, extenderemos esta idea al caso de la molécula de H_2 , donde la estabilidad molecular es explicada principalmente en términos del tunneling correlacionado de los dos electrones.

Finalmente, también discutiremos los enlaces iónico y de Van der Waals, con lo que tendremos un panorama de las diferentes “fuerzas” que dan lugar a estructuras moleculares estables.

Por último, presentaremos un resumen del método de orbitales moleculares y las técnicas de optimización. Este procedimiento es uno de los más utilizados en los cálculos de química cuántica actualmente. Para ello, introduciremos el método LCAO y las ideas principales del procedimiento de campo autoconsistente utilizado para el cálculo de la función de onda.

1.2 El ión molecular hidrógeno H_2^+ . Ligadura por tuneleo de un electrón

La forma molecular más simple en la naturaleza es el ión molecular de hidrógeno H_2^+ , que es una estructura estable de dos protones y un electrón. Este ejemplo, junto con la molécula de hidrógeno neutra, ilustra algunos de los principios básicos involucrados en la estructura molecular, esencialmente la ligadura covalente.

Una simplificación muy importante para el análisis teórico de la estructura molecular es la *aproximación de Born-Oppenheimer*, que también se aplica en teoría del estado sólido. En el Apéndice de este capítulo describimos de manera resumida los pasos principales de la formulación de esta hipótesis. Físicamente, la idea está motivada en la gran diferencia entre las masas de núcleos y electrones. De acuerdo con esta característica, desde un punto de vista clásico se considera que la dinámica electrónica es mucho más “rápida”, lo que justificaría la hipótesis de que ambos tipos de movimientos pueden

1.2. EL IÓN MOLECULAR HIDRÓGENO H_2^+ . LIGADURA POR TUNELEO DE UN ELECTRÓN

considerarse desacoplados. Traducido a la mecánica cuántica, se asume que la función de onda total es un producto de funciones de onda nuclear y electrónica, es decir, se supone que ambos grados de libertad están descorrelacionados² y consistentemente se considera que la energía cinética nuclear no afecta a las variables electrónicas. Con estas consideraciones, se logra separar la ecuación de Schrödinger en dos ecuaciones, una para los electrones (considerando la separación nuclear como parámetro) y otra para los núcleos, con la particularidad que las autoenergías del problema electrónico consituyen potenciales efectivos para la ecuación que describirá la dinámica de los núcleos. De forma menos precisa, la idea está motivada en la intuición semi-clásica que anticipa que los electrones pueden “ajustar casi instantáneamente” su función de onda para cada valor de la distancia internuclear³.

El caso del ion H_2^+ es el único en que existe una solución matemática exacta.⁴ Sin embargo, a los fines de discutir las características principales del problema resulta útil encontrar una solución aproximada, en un enfoque perturbativo o variacional. Dentro de la aproximación de BO buscamos un resultado aproximado para el potencial efectivo provisto por el electrón en su dinámica regida por el Hamiltoniano de interacción Coulombiana, calculando las energías electrónicas como funciones paramétricas de la distancia internuclear.

Con este propósito, se propone una función de onda electrónica que satisface los requerimientos de simetría y comportamientos límites. La ecuación de Schrödinger para las autofunciones electrónicas es

$$H\psi_e = \varepsilon\psi_e, \quad (1.1)$$

donde el Hamiltoniano H incluye los términos de atracción Coulombiana del electrón con los protones, y la energía de repulsión entre los protones

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_r^2 - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}|} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}|} + \frac{ke^2}{R} \right\} \psi_e(\mathbf{r}) = \varepsilon_e \psi_e(\mathbf{r}), \quad (1.2)$$

donde m_e es la masa del electrón y $k \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ con ϵ_0 la constante de permitividad del vacío.

² Este tipo de hipótesis se usa en los casos en que una parte de un sistema compuesto genera un campo efectivo para la otra parte, como por ejemplo, una partícula en un pozo de potencial.

³ Aunque no es posible demostrar esta aseveración, en algunos textos, como por ejemplo M. Weissbluth, *Atoms and molecules*, Academic Press (1978) se muestran los pasos que llevan a escribir las ecuaciones separadas para ambos grados de libertad.

⁴ La estructura matemática de la solución exacta es complicada, por lo que generalmente se recurre a expresarla de manera gráfica, mediante métodos numéricos. Es útil consultar el sitio <http://www.nyu.edu/classes/tuckerman/adv.chem/lectures/lecture13/node3.html>, y el trabajo de T. Scott *et al.* New Approach for the Electronic Energies of the Hydrogen Molecular Ion, Chem. Phys. 324 (2005)

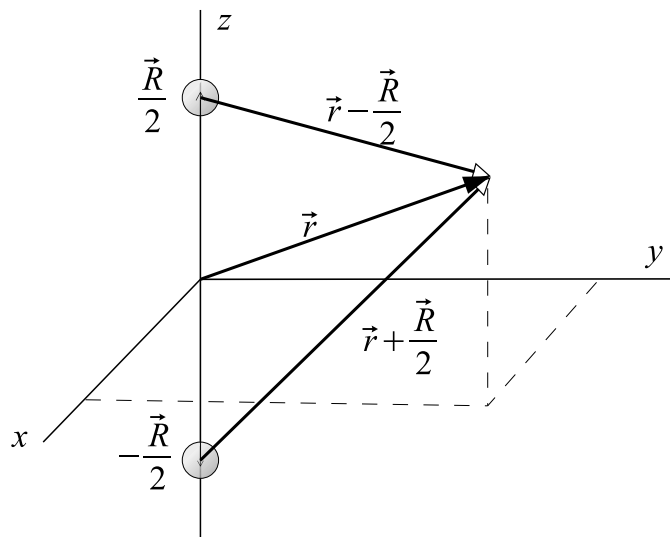


FIGURE 1.1: Sistema de referencia para el electrón y los núcleos del ion molecular H_2^+ .

En la Figura (1.1) se muestra la disposición de los núcleos a lo largo del eje z , separados por una distancia R , y la posición \mathbf{r} del electrón. En el marco de la aproximación de BO, la distancia internuclear R se mantiene constante, como un parámetro durante el cálculo de las autofunciones electrónicas, y las autoenergías electrónicas jugarán el rol de potenciales efectivos (como funciones de R), que controlan la dinámica de los núcleos para cada estado electrónico.

La Figura (1.2) representa un esquema bidimensional del potencial electrostático Coulombiano que ve el electrón, provisto por los núcleos. Supongamos que tenemos uno sólo de los pozos de potencial, por ejemplo el que está centrado en $z = R/2$. Este problema es conocido, y la solución de la ecuación de Schrödinger para el estado de menor energía es el orbital atómico $\phi_{1s}(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2})$, es decir el estado hidrogenoide $1s$ centrado en $\mathbf{r} = \frac{\mathbf{R}}{2}$. Análogamente, para un electrón en un pozo de potencial centrado en $\mathbf{r} = -\frac{\mathbf{R}}{2}$, el estado fundamental es $\phi_{1s}(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2})$. En ambos casos, la energía es la misma, ϵ_{1s} .

Ahora consideremos un electrón en presencia de los dos protones y analicemos las propiedades globales de la función de onda del problema combinado. Cuando el e^- se encuentra en las proximidades de $\mathbf{r} = \pm \frac{\mathbf{R}}{2}$, esperamos que la función de onda del estado fundamental sea aproximadamente

1.2. EL IÓN MOLECULAR HIDRÓGENO H_2^+ . LIGADURA POR TUNELEO DE UN ELECTRÓN

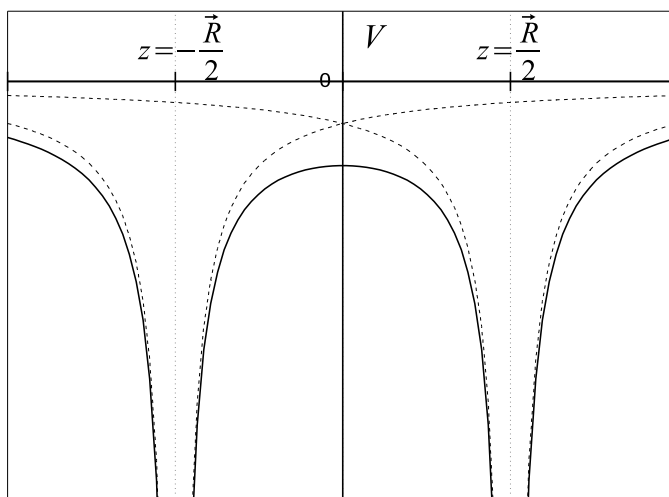


FIGURE 1.2: Esquema plano del potencial electrostático que ve el electrón a lo largo del eje z , debido a los núcleos ubicados en posiciones fijas, de acuerdo con la aproximación de Born-Oppenheimer.

$\phi_{1s}(\mathbf{r} \mp \frac{\mathbf{R}}{2})$. Otra propiedad necesaria de la función de onda proviene de la simetría del potencial alrededor de $\mathbf{r} = 0$, lo que implica que la probabilidad debe ser par con respecto a \mathbf{r} , $P(\mathbf{r}) = P(-\mathbf{r})$, y por lo tanto $\psi_e(-\mathbf{r}) = \pm\psi_e(\mathbf{r})$. Es decir que la función de onda tiene paridad definida.

Autofunciones que satisfacen los dos requerimientos globales de simetría y comportamiento límite, son de la forma

$$\psi_+(\mathbf{r}) = c_+ \left[\phi_{1s}\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}\right) + \phi_{1s}\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}\right) \right] \quad (1.3)$$

y

$$\psi_-(\mathbf{r}) = c_- \left[\phi_{1s}\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}\right) - \phi_{1s}\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}\right) \right]. \quad (1.4)$$

Las constantes de normalización tienen el valor

$$c_{\pm} = \sqrt{2(1 \pm S)}, \quad \text{donde} \quad S \equiv \int \phi_{1s}\left(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}\right)\phi_{1s}\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}\right)d^3\mathbf{r}$$

es la integral de *overlap*. Cuando $\mathbf{r} \simeq \frac{\mathbf{R}}{2}$, entonces $\phi_{1s}(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}) \simeq \phi_{1s}(R) \ll \phi_{1s}(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2})$, por esta razón se puede aproximar

$$\psi_{\pm} \simeq c_{\pm} \phi_{1s}(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}).$$

Análogamente, cuando $\mathbf{r} \simeq -\frac{\mathbf{R}}{2}$, las soluciones propuestas cumplen la condición límite $\psi_{\pm} \simeq c_{\pm} \phi_{1s}(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2})$. Es decir la función de onda del sistema compuesto tiende en ambos casos a los orbitales atómicos centrados en cada protón.

Para estudiar la paridad de la probabilidad asociada con las funciones aproximadas, escribamos la función de onda evaluada en $-\mathbf{r}$

$$\psi_{\pm}(-\mathbf{r}) = c_{\pm} \left[\phi_{1s}(-\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}) \pm \phi_{1s}(-\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}) \right]. \quad (1.5)$$

Recordando las propiedades de paridad de los orbitales atómicos del átomo de hidrógeno, $\phi_{1s}(\mathbf{r}) = \phi_{1s}(-\mathbf{r})$, es directo verificar que se cumple $\psi_{\pm}(-\mathbf{r}) = \pm \psi_{\pm}(\mathbf{r})$, por lo que sigue que la probabilidad es una función par de \mathbf{r} .

Habiendo generado las funciones ψ_{\pm} como soluciones aproximadas de los estados de menor energía del Hamiltoniano de la Ec. (1.2), correspondientes a los núcleos ubicados con una separación fija R , ahora calculamos los valores de expectación del Hamiltoniano para cada uno de los v estados propuestos, para encontrar las energías electrónicas como función de la separación internuclear. Entonces, las energías correspondientes a las funciones (1.3) y (1.4) son:

$$\varepsilon_{\pm} = \langle H \rangle_{\psi_{\pm}} = \int \Psi_{\pm}^* \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_r^2 - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}|} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}|} + \frac{ke^2}{R} \right\} \psi_{\pm} d^3\mathbf{r}. \quad (1.6)$$

Recordemos que como consecuencia de la hipótesis de BO las energías electrónicas calculadas para R fijo representan potenciales efectivos $\varepsilon_{\pm} \equiv V_{\pm}(R)$ que generan la dinámica de los núcleos.

El cálculo del valor de expectación puede hacerse de forma directa pasando a un sistema de coordenadas esféricas proladas⁵. Para expresar los resultados de manera compacta, utilizamos la notación de Dirac y definimos:

$$\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2} \equiv \mathbf{r}_A, \quad \mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2} \equiv \mathbf{r}_B,$$

$$\phi_{1s}(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}) \equiv |\phi_A\rangle \quad \text{y} \quad \phi_{1s}(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}) \equiv |\phi_B\rangle.$$

⁵Una presentación detallada del procedimiento puede consultarse en la referencia P.W. Atkins and R.S. Friedman, *Molecular Quantum Dynamics*, Oxford University Press (2005)

1.2. EL IÓN MOLECULAR HIDRÓGENO H_2^+ . LIGADURA POR TUNELEO DE UN ELECTRÓN

Definimos, además, la integral de Coulomb

$$M \equiv k \langle \phi_A | \frac{1}{r_B} | \phi_A \rangle = k \langle \phi_B | \frac{1}{r_A} | \phi_B \rangle$$

y la integral de 'resonancia'

$$N \equiv k \langle \phi_A | \frac{1}{r_A} | \phi_B \rangle = \langle \phi_B | \frac{1}{r_B} | \phi_A \rangle.$$

La integral de Coulomb tiene una interpretación clásica directa, dado que representa la energía Coulombiana de interacción entre una densidad de cargas $e|\phi_A|^2$ y el núcleo B . Por el contrario, la integral de resonancia no tiene contrapartida clásica, ya que no corresponde a un valor de expectación.

Con estas definiciones, el cálculo de los valores de expectación de la Ec. (1.6) se resume en las siguientes expresiones:

$$\varepsilon_+ = E_{1s} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} - \frac{M}{1+S} - \frac{N}{1+S} \quad (1.7)$$

$$\varepsilon_- = E_{1s} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} - \frac{M}{1-S} + \frac{N}{1-S}, \quad (1.8)$$

$$M = \frac{k}{R} \left\{ 1 - \left(1 + \frac{R}{a_0} \right) e^{-2R/a_0} \right\}, \quad (1.9)$$

$$N = \frac{k}{a_0} \left(1 + \frac{R}{a_0} \right) e^{-R/a_0}, \quad (1.10)$$

$$S = \left\{ 1 + \frac{R}{a_0} + \frac{1}{3} \left(\frac{R}{a_0} \right)^2 \right\}^{-R/a_0}, \quad (1.11)$$

donde a_0 es el radio de Bohr. En las expresiones (1.7) y (1.8) para las energías podemos ver que hay una diferencia de signo en la contribución de la integral de resonancia o tunneling. Este signo marca la diferencia, ya que ε_+ tiene un mínimo debido a que la contribución asociada con el overlap de las funciones de onda de los orbitales atómicos en la región intermedia entre los núcleos, se suma a la contribución de Coulomb compensando la energía de repulsión internuclear. Esto indica la existencia de una estructura molecular estable, relacionada con la función de onda ligante ψ_+ . En cambio, en ε_- no existe mínimo, lo que implica el carácter antiligante de ψ_- . La Figura (1.3) ilustra los potenciales efectivos que ven los núcleos debido a la dinámica electrónica, en ambos casos.

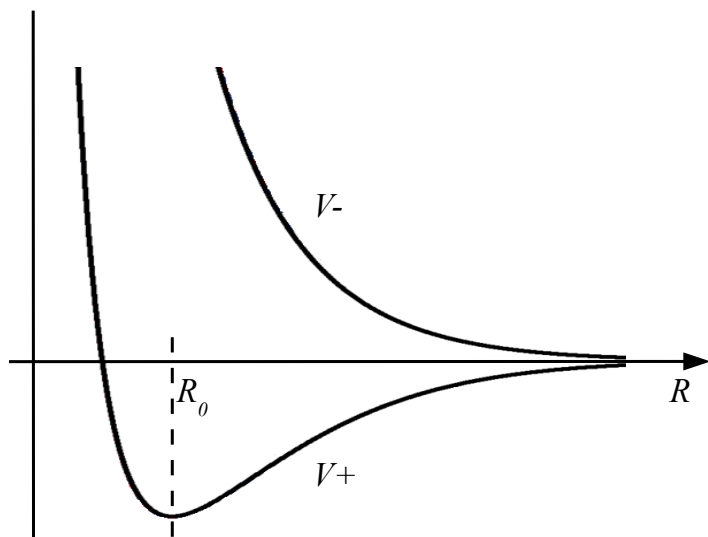


FIGURE 1.3: Potenciales efectivos generados por el electrón, calculados con las funciones de onda ligante y antiligante mediante la ecuación (1.6). R_0 es la distancia internuclear correspondiente al mínimo del potencial efectivo que se obtiene con la función de onda ligante

Para interpretar el origen de las denominaciones ‘resonancia’ ó ‘tunneling’ de la contribución cuántica, nos referimos a problemas unidimensionales, como por ejemplo dos pozos de potencial separados por una barrera o un oscilador cuántico doble. En esos casos se ve rápidamente que si la partícula es ubicada a $t = 0$ en uno de los mínimos del potencial, la evolución posterior de la función de onda consiste en una superposición de amplitudes de probabilidad localizadas en ambos pozos, de manera que cuando una es máxima la otra se anula. La frecuencia de esta oscilación es precisamente $(\epsilon_+ - \epsilon_-)/\hbar$ y la partícula transcurre entre los dos estados localizados $\psi_+ \pm \psi_-$. En los estados j (1.3) y (1.4), la densidad de probabilidad electrónica es

$$|\psi_{\pm}|^2 = \frac{1}{2}[|\phi_A|^2 + |\phi_B|^2 \pm \phi_A\phi_B], \quad (1.12)$$

donde el signo positivo corresponde al estado ligante y el negativo al antiligante. En el primero, el término de interferencia contribuye a la densidad electrónica en la región entre los núcleos. En el segundo, la densidad de probabilidad es nula

en el centro y muy pequeña en las regiones intermedias.

1.3 Ligadura covalente. La molécula de H₂. Teoría de Heitler-London.

El siguiente paso en orden de complejidad, luego del ión molecular H₂⁺, es la molécula de hidrógeno neutra, H₂, que corresponde a dos protones y dos electrones. Este caso es un ejemplo paradigmático del tipo de enlace covalente, que dió lugar a la escuela de “teoría de ligadura de valencia” iniciada a partir de la propuesta de Heitler y London (HL), publicada en los comienzos mismos de la mecánica cuántica.

Los electrones son partículas indistinguibles por lo que la función de onda total debe satisfacer la condición de antisimetría. El razonamiento de HL (1927) puede desarrollarse partiendo de un sistema donde los dos protones se encuentran juntos en $\mathbf{r} = 0$, por lo que tendríamos la carga correspondiente al núcleo de He. El estado fundamental para este sistema es una configuración $1s^2$, con una autofunción de la forma

$$\psi(1, 2) = \phi_{1s}(\mathbf{r}_1)\phi_{1s}(\mathbf{r}_2)\chi^S(1, 2), \quad (1.13)$$

donde $\chi^S(1, 2)$ es la función de onda de espín antisimétrica (singlete), y las funciones orbitales son orbitales atómicos hidrogénicos. Así, $\psi(1, 2) = -\psi(2, 1)$ satisfaciendo la condición necesaria de antisimetría para los electrones. Ahora ‘separamos’ los dos protones a una distancia R , a lo largo del eje z , y asumimos que cada electrón permanece asociado a diferentes protones. La nueva función de onda quedaría escrita en la forma

$$\psi(1, 2) \rightarrow \phi_{1s}(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2})\phi_{1s}(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2})\chi^S(1, 2), \quad (1.14)$$

Esta función aún no puede ser la solución del problema, dado que no es antisimétrica y tampoco incluye como estado posible aquel en que el electrón de cada uno de los átomos pueda encontrarse de manera indistinguible en la vecindad del otro núcleo. Entonces se propone una solución que satisface estas dos premisas íntimamente relacionadas:

$$\begin{aligned} \psi(1, 2)_S^{HL} = & \frac{1}{\sqrt{2}}\chi^S(1, 2) \times \\ & \times \left\{ \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2})\phi_{1s}(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}) + \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2})\phi_{1s}(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \right\}. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Esta es la función de onda de HL, que consiste en una superposición de dos estados, con la misma amplitud de probabilidad, donde cada estado corresponde

a los electrones asociados a ambos núcleos. En una visión semiclásica, podemos interpretar que los electrones se intercambian (tunneling) entre los dos protones de manera que siempre hay uno de ellos en cada protón. Esta propuesta no favorece configuraciones en las que ambos electrones se encuentren en las proximidades de un mismo núcleo. Veremos enseguida que este modelo predice de manera aceptable las propiedades estructurales de la molécula de H_2 , aunque una pequeña ‘mezcla’ con un estado de doble ocupación mejora las propiedades de ligadura.

Otra posible función de onda en un modelo como éste, construída a partir de orbitales atómicos, sería un producto de una función de onda ‘orbital’ antisimétrica y una función de espín simétrica (triplete) $\chi^T(1, 2)$:

$$\begin{aligned} \psi(1, 2)_T^{HL} = & \frac{1}{\sqrt{2}} \chi^T(1, 2) \times \\ & \times \{ \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{1s}(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}) - \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{1s}(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \}. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Del análisis del módulo cuadrático de las funciones de onda de las dos partículas se puede visualizar que las dos soluciones propuestas tienen asociadas distribuciones de probabilidad de características muy distintas. Así, partiendo de las densidades $P_{S,T} \equiv |\psi_{S,T}|^2$ (singlete o triplete) podemos anticipar que $\psi(1, 2)_S^{HL}$ y $\psi(1, 2)_T^{HL}$ representan estados ligante y antiligante, respectivamente,

$$\begin{aligned} P_{S,T} = & \frac{1}{2} [\phi_{1s}^2(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{1s}^2(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}) + \phi_{1s}^2(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{1s}^2(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \\ & \pm 2 \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{1s}(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{1s}(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2})]. \end{aligned} \quad (1.17)$$

En la ecuación anterior, los dos primeros términos son máximos cuando los electrones están en las proximidades de cada núcleo. El término cruzado, de interferencia, depende del overlap de las funciones de onda, que es máximo en la región intermedia entre los núcleos. Para el caso del singlete (P_S), esta contribución se suma, mientras que se resta para el triplete (P_T). El aumento de la probabilidad en la región intermedia favorece la ligadura, como en el caso del ión molecular (estado ligante). Contrariamente, en el caso del triplete, se trata de un estado antiligante. Estas características se apreciarán más evidentemente al calcular la energía asociada con estos estados, como veremos más adelante.

Recordemos que la interpretación probabilística de la función de onda en el caso de muchas partículas es una generalización de la de una partícula. En general, para un sistema de N partículas, la cantidad

$$|\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 \prod_{j=1}^N d\mathbf{r}_j \quad (1.18)$$

1.3. LIGADURA COVALENTE. LA MOLÉCULA DE H₂. TEORÍA DE HEITLER-LONDON.

se interpreta como la probabilidad de encontrar las N partículas en el volumen $3N$ -dimensional $\prod_{j=1}^N d\mathbf{r}_j$ que rodea al punto $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ en el espacio configuracional. Si bien toda la información disponible sobre el sistema se encuentra en esta función de onda, la ecuación (1.18) no tiene una interpretación simple en términos de una distribución que dependa de las tres coordenadas de un punto en el espacio. En sistemas de muchos electrones, el cálculo de propiedades físicas a partir directamente de la función $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ puede resultar muy complicado o aún imposible. Para resolver esta dificultad se introduce el concepto de *densidad de partículas*, es decir la probabilidad de que cualquiera de los N electrones (el primero, el segundo, ..., el N -ésimo) se encuentre en la posición \mathbf{r}

$$n(\mathbf{r}) = N \int \psi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N, \quad (1.19)$$

y

$$\int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = N. \quad (1.20)$$

Esta magnitud está relacionada con la densidad electrónica a través de la carga q del electrón

$$\rho(\mathbf{r}) = qn(\mathbf{r}). \quad (1.21)$$

y se puede determinar experimentalmente, por ejemplo mediante experimentos de difracción de R-X o neutrones.

La utilidad teórica de $n(\mathbf{r})$ para los cálculos de estructura molecular radica en el importante hecho de que la energía del sistema puede ser expresada en términos de la densidad de probabilidad electrónica. La energía es un funcional de esta cantidad en el estado fundamental de cualquier sistema. Esta propiedad es la base de la teoría del funcional densidad (DFT- density functional theory). El teorema de P. Hohenberg y W. Kohn establece que la energía del estado fundamental, y cualquier propiedad electrónica del estado fundamental están unívocamente determinadas por la densidad electrónica. En un paso posterior, se derivó un conjunto de ecuaciones (W. Kohn and L.J. Sham ⁶) en términos de cantidades de un sólo electrón a partir del cual se puede deducir la densidad electrónica. ^{7 8}

Así, para la molécula de H₂

$$|\Psi(1, 2)^{HL}|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (1.22)$$

⁶W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev., 1133, A140 (1965).

⁷W. Kohn, Nobel Lecture: Electronic structure of matter-wave functions and density functionals, Rev. Mod. Phys. 71, 1253 (1999).

⁸P. Atkins and R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 4-th Ed., Oxford (2005).

es la probabilidad conjunta del estado en que las dos partículas se encuentran en el volumen 6-dimensional $d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$ que rodea al punto $\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2$ del espacio configuracional 6-dim. Es decir es la probabilidad de encontrar a un electrón alrededor de \mathbf{r}_1 y otro electrón alrededor de \mathbf{r}_2 . La densidad electrónica $n(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ es la probabilidad de encontrar un electrón en el elemento de volumen $d\mathbf{r}$, y de acuerdo con (1.21), esta cantidad se obtiene sumando (integrando) $|\Psi(1, 2)^{HL}|^2$ sobre \mathbf{r}_2 para todas las configuraciones en las que \mathbf{r}_1 está fijo y luego sumando el resultado del procedimiento inverso⁹. El resultado de este procedimiento para las funciones de onda (1.15) y (1.16) se muestra en la Figura (1.4)

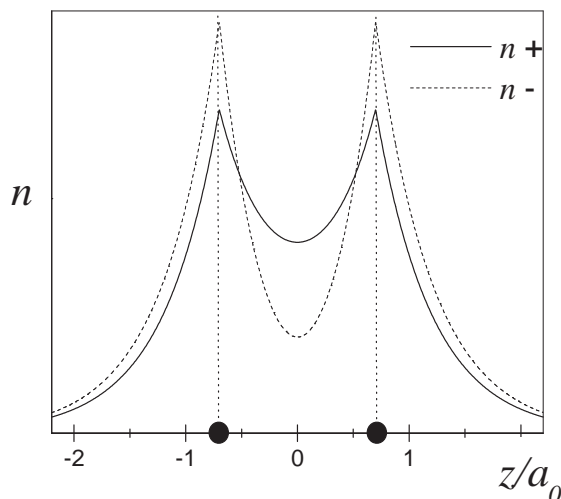


FIGURE 1.4: Densidades electrónicas correspondientes a las funciones de onda de Heitler-London. La densidad ligante presenta mayor intensidad en la región entre núcleos.

Para calcular las energías electrónicas, nuevamente se asume que la distancia interprotones R es fija, tomando esta distancia como un parámetro, en el contexto

⁹D.W. Oxtoby, H.P. Gillis and A. Campion, *The Principles of Modern Chemistry*, 6-th Ed., Thomson (2008)

1.3. LIGADURA COVALENTE. LA MOLÉCULA DE H₂. TEORÍA DE HEITLER-LONDON.

de la aproximación de BO. Dentro de este programa, se calculan las energías correspondientes a las dos autofunciones para un conjunto de valores de R , y se interpreta el resultado como una energía potencial efectiva para los núcleos provista por un campo medio asociado con los electrones. El cálculo de las energías es similar al caso del ion molecular. En este procedimiento se calcula el valor de expectación del Hamiltoniano de los electrones para una distancia interprotones R , incluyendo los términos Coulombianos de atracción de los electrones por los núcleos y de repulsión electrón-electrón. Generalizando la ecuación (1.6)

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\pm} &= \langle H \rangle_{\Psi_{\pm}} \\ &= \int \Psi_{\pm}^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_2}^2 - \frac{ke^2}{|\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2}|} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2}|} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}|} - \frac{ke^2}{|\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2}|} \right. \\ &\quad \left. + \frac{ke^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{ke^2}{R} \right) \Psi_{\pm} d^3\mathbf{r}.\end{aligned}\tag{1.23}$$

Similarmente al caso del ion H₂⁺, al calcular las energías correspondientes a las autofunciones aproximadas $\Psi(1, 2)_S^{HL}$ y $\Psi(1, 2)_T^{HL}$, se obtienen

$$\varepsilon_{\pm}(R) = 2E_{1s} + G' \pm S',\tag{1.24}$$

donde G' y S' representan la contribución Coulombiana y la interferencia (ó término de intercambio), respectivamente. El signo más corresponde al singlete y el menos al triplete. Dado que S' resulta negativo, la energía del singlete es menor, y además presenta un mínimo pronunciado. La energía de formación de la molécula que surge del modelo de HL es alrededor del 67% del valor experimental $D_{exp} = 102,6$ kcal/mol, mientras que la distancia de equilibrio es $R_0 = R_{0exp} + 0,05A = (0,74 + 0,05)\text{Å}$. Los gráficos de los potenciales son similares a los de la Figura (1.3).

El modelo de HL puede ser "mejorado" para reproducir más ajustadamente la energía de disociación. Parte de las mejoras se obtiene agregando a Ψ_S^{HL} un término que representa la doble ocupación de un protón por dos electrones:

$$\begin{aligned}\Psi(1, 2)_S &= \Psi(1, 2)_S^{HL} + \\ &\quad \frac{\gamma}{\sqrt{2}} \{ \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{1s}(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2}) + \phi_{1s}(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{1s}(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}) \} \chi^A(1, 2),\end{aligned}\tag{1.25}$$

donde γ es un coeficiente ajustable. Estos dos términos agregados aportan probabilidad de que los dos electrones se encuentren en proximidades de un mismo núcleo. De la comparación con resultados experimentales, surge como mejor valor $\gamma = 0,2$. Dado que ambas configuraciones iónicas son igualmente probables, no hay una redistribución neta de carga que pueda aportar un momento dipolar eléctrico. Esta modificación permitió acercar la energía de disociación un 5% hacia el valor experimental.

Otras correcciones posteriores permitieron reproducir finalmente D_{exp} y R_{0exp} . Uno de los agregados al modelo consistió en utilizar orbitales atómicos modificados introduciendo un número atómico efectivo $Z' = 1,17$. Esto permitió mejorar la forma de la función de onda para una mejor ajuste con la distancia internuclear. Finalmente, se consiguió un excelente acuerdo mediante una estrategia de deformación de orbitales, término que se utilizó para describir la inclusión de las interacciones más complejas que se descartaron en el modelo simple inicial, como los efectos debido a la polarización¹⁰.

En moléculas más complicadas, generalmente hay un “carozo cerrado” de electrones muy ligados a sus núcleos originales, y que participan muy poco o nada del fenómeno de intercambio. En cambio, los electrones externos sí participan fuertemente del intercambio y son denominados *electrones de valencia*. En las ligaduras del tipo de las de la molécula de H_2 estos electrones participan cooperativamente, por lo que a este tipo de enlace se lo denomina *enlace covalente*.

1.4 Enlace iónico.

En aquellos casos en los que pueda asignarse a cada átomo de un par (o de un grupo de átomos) una estructura electrónica definida esencialmente independiente de la presencia del otro átomo o grupo, y tal que se establecen interacciones electrostáticas que llevan a una atracción fuerte entre los átomos y la formación de un enlace químico, hablamos de un enlace electrostático. El *enlace iónico* es el ejemplo más importante de este tipo de ligaduras químicas.

Al estudiar el enlace covalente y el ion hidrógeno molecular, vimos que la simetría impone que la distribución de probabilidad electrónica se distribuya igualitariamente entre ambos sitios nucleares. Eso llevó a asumir que en la naturaleza la estabilidad de las moléculas diatómicas homonucleares se debe en gran medida a los electrones comportándose colectivamente para proveer una distribución adecuada que brinda una energía potencial a los núcleos que posee un mínimo que corresponde a una configuración de equilibrio estable. La

¹⁰Algunos detalles de estas correcciones, que se hicieron en los albores de las ideas de la covalencia, están descriptos en L. Pauling, *The nature of the chemical bond*, 3era edición (1960)

1.4. ENLACE IÓNICO.

función de onda es una superposición de dos estados, que garantiza la simetría y el principio de exclusión. En el caso opuesto se encuentra el enlace iónico, que ocurre entre dos átomos de naturaleza muy diferente, uno con baja energía de ionización (como los elementos alcalinos, Na, Li, etc.), y otro con la capa externa con un electrón faltante para llenarse (elementos halógenos, Cl, F, etc.). En este caso, la distribución electrónica es fuertemente asimétrica.

Para estudiar las características más importantes de este fenómeno consideremos la formación de moléculas diatómicas como el cloruro de sodio (ClNa) y el fluoruro de litio (FLi). En este tipo de moléculas, se asocian dos átomos de propiedades muy diferentes, y que resultan complementarias para favorecer una estructura estable. Por ejemplo, el átomo de Na es alcalino, con un electrón de valencia de configuración $3s$ y capas internas llenas. La energía de ionización de este elemento es 5.1 eV , una de las más bajas en la tabla periódica, junto con los otros elementos alcalinos (Li, K, Rb, Cs, Fr). El enlace atómico es relativamente débil ya que las capas internas apantallan eléctricamente al electrón de la atracción del núcleo, por lo que se mueve en un campo efectivo débil y en regiones externas. Por otro lado, el Cl es un elemento halógeno, cuya última capa tiene configuración electrónica $3s^2 3p^5$, es decir que le falta solamente un electrón para completar su última capa y formar el ión negativo Cl^- . El halógeno tiene una *afinidad electrónica* elevada, es decir que el ión correspondiente a la capa completa tiene una energía bastante menor que el átomo neutro, ya que al completar la capa externa la energía del átomo se reduce en 3.8 eV . Por lo tanto, con un costo energético relativamente bajo, $(5.1 - 3.8) \text{ eV} = 1,3 \text{ eV}$, se pueden formar dos iones de distinto signo, Na^+ y Cl^- . Estos iones se atraerán mediante fuerzas electrostáticas, por lo que a medida que se aproximan disminuye la energía del sistema compuesto.

Supongamos que los átomos se encuentran separados por una gran distancia, cuando aún no hay interacción apreciable entre las partes, tanto la superposición de dos átomos neutros ó de dos iones son estados posibles. Claramente, estos dos estados no son degenerados ya que tienen energías diferentes, siendo algo mayor la del sistema de iones (ya que para formar los iones a partir de los átomos neutros hay que entregar energía).

El estado correspondiente a los átomos neutros es prácticamente insensible ante la variación de la distancia en un rango amplio de distancias. Si no incluimos efectos mutuos de redistribución de cargas por interacción electromagnética, este estado no se altera, salvo cuando los átomos se encuentran separados a muy corta distancia, debido a la repulsión internuclear y los efectos de la exclusión electrónica.

En el caso de los iones, la energía de partida es ligeramente mayor que el caso de los átomos neutros. Sin embargo, debido a la atracción electrostática entre los

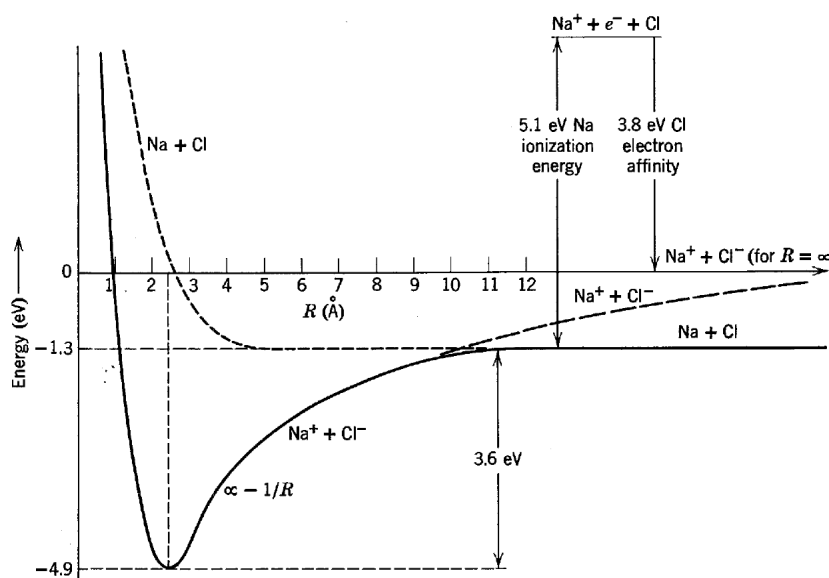


FIGURE 1.5: Esquemas de los potenciales efectivos de una ligadura iónica. El potencial de atracción electrostática compensa la energía de ionización de los átomos neutros a partir de una dada separación interatómica, y es posible tener un mínimo debido al balance de la atracción y repulsión inter-iónica en $R = R_0$. Figura tomada del texto de R. Eisberg and R. Resnick, *Quantum Physics*, 2nd Edition, Wiley and Sons (1985).

iones, para separaciones todavía grandes, la energía potencial nuclear del sistema disminuye y cruza por debajo de la energía de los átomos neutros (*crossover*). A distancias menores la competencia entre esta atracción electrostática y la repulsión produce un mínimo de la energía potencial, correspondiente a una situación de estabilidad.

Esto puede interpretarse en el sentido de que a distancias por debajo de la intersección entre ambas curvas de potencial, ionizar al átomo de Na implica reducir la energía total (debido a la atracción Coulombiana). Esto indica que el mecanismo del enlace iónico reduce apreciablemente la energía potencial con respecto a la situación de dos átomos neutros interactuando a través de sus distribuciones de carga, haciendo que la estructura iónica sea mucho más estable que la covalente. La energía liberada al formarse la ligadura iónica compensa largamente la energía necesaria para la ionización.

La naturaleza predominantemente iónica de un enlace de este tipo se ve

1.4. ENLACE IÓNICO.

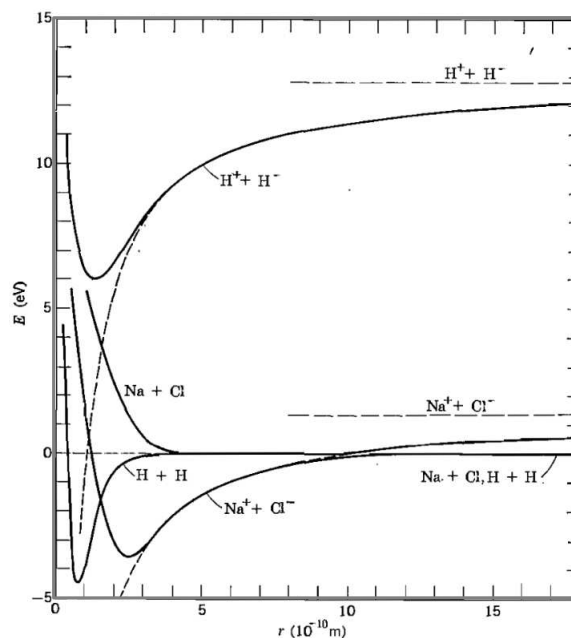


FIGURE 1.6: Esquema comparativo de la evolución de la energía en función de la distancia internuclear de los átomos ionizados, para los casos de las moléculas de H_2 y $NaCl$. Figura tomada del texto R. Leighton, *Principles of Modern Physics*, McGraw-Hill (1959).

favorecido al ser pequeña la diferencia de energías de las dos situaciones, para separación infinita. Así, la atracción Coulombiana logra invertir la relación entre las energías de ambos estados (crossover) a distancias muy grandes, y puede dar lugar a que ocurra un mínimo estable a distancias mucho menores que la del crossover. Esta característica se aprecia en la Figura (1.5).

Para ver un caso donde esto no se verifica, analicemos la molécula de H_2 . En este caso, la energía para lograr $H^+ + H^-$ es muy elevada (12.7 eV), y no existe el punto de crossover. La estabilidad de la molécula se explica esencialmente por el fenómeno de covalencia. En este caso, la componente iónica del enlace es pequeña debido a que la estructura iónica es inestable porque no puede ser contrabalanceada por la atracción coulombiana.

El grado de "ionicidad" u homoplalidad de una dada molécula puede asociarse empíricamente con el cruce de las curvas de potencial. Si la curva de los átomos ionizados cae por debajo de la de los átomos neutros a una separación significativamente mayor que la separación de equilibrio, R_0 , la ligadura sería

mayoritariamente iónica. Como ejemplos extremos, en el ClNa, el cruce se dá en $R_c \simeq 5R_0$, mientras que en el H₂ el cruce no se produce nunca.

1.5 Enlace mixto iónico-covalente

En muchos casos, el enlace iónico no explica la totalidad de las propiedades de la curva de energía potencial molecular, y es necesario asumir que el enlace tiene una cierta proporción de covalencia. Esta característica puede estudiarse experimentalmente a través del momento dipolar molecular. Por ejemplo, en el FLi la distancia interatómica es $R_0 = 0.56nm$, por lo que el momento dipolar molecular debería adoptar el valor $p_{teor} = 2.5 \times 10^{-29}$ C m. Sin embargo, el valor experimental reportado es menor, $p_{exp} = 2.11 \times 10^{-29}$ C m, lo que se interpreta como que el FLi es parcialmente iónico y parcialmente covalente.

Las configuraciones electrónicas del Li y el F son, respectivamente, $2s$ y $2s^2 2p^5$. La afinidad electrónica del F es $3.4 eV$ y la energía de ionización del Li es $5.4 eV$.

Entonces, la función de onda que representa una superposición de los estados iónico y covalentes, sería de la forma

$$\begin{aligned} \Psi(1, 2) = & \left\{ A \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{2s}(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{2p_z}(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}) + \phi_{2p_z}(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{2s}(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2})] \right. \\ & + B \phi_{2s}(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{2s}(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2}) \\ & \left. + C \phi_{2p_z}(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2}) \phi_{2p_z}(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}) \right\} \chi^T(1, 2). \end{aligned} \quad (1.26)$$

El primer término es la contribución covalente, que involucra al electrón externo del Li y a un electrón p_z de la capa externa del F. El término proporcional B es muy pequeño comparado con la otra contribución iónica, es decir el término proporcional a C , debido que la probabilidad de que los dos electrones se encuentren en las proximidades del átomo de litio es muy baja. Esto es así ya que la afinidad electrónica del Li es muy baja ($0.6 eV$) mientras que la energía de ionización del F es alta ($16.8 eV$). Inversamente, la energía de ionización del Li es baja ($5.4 eV$) y la afinidad del F es alta ($3.4 eV$). Entonces, es una buena aproximación asumir que $B \simeq 0$. En esta aproximación el momento dipolar de la molécula es $p = eRC^2$. Experimentalmente, $p/eR = 0.85$, con lo que estimamos $C \simeq 0.9$ y $A \simeq 0.4$ y $C^2/A^2 \simeq 5.3$. Es decir, el carácter iónico de la ligadura es mucho más marcado que el aspecto covalente.

1.6 Interacción de Van der Waals

El último tipo de enlace molecular que discutiremos es el de Van der Waals. Describiremos brevemente, de manera clásica, la idea sobre este tipo muy importante de interacción que es de carácter general, muy poco dependiente de la estructura de la molécula, y que es responsable de la condensación de un gas en un líquido o un sólido. Este tipo de enlace provee una ligadura para la formación de moléculas que involucran átomos nobles (capas llenas) que no pueden formar enlace covalente por el principio de exclusión de Pauli.

El mecanismo que provee la fuerza de atracción interatómica en este caso está basado en la interacción electromagnética de las distribuciones electrónicas de ambos átomos. Históricamente, F. London desarrolló un cálculo mecánico cuántico para explicar la fuerza de atracción de átomos de gases nobles basado en una aproximación perturbativa de segundo orden. Expandiendo el potencial perturbativo en serie de Taylor de $1/R$, y combinando con las energías de segundo orden, se obtiene una expresión que se parece de algún modo a una energía de interacción entre multipolos instantáneos de ambos átomos. En base a esta característica, se introdujo una aproximación para expresar la fuerza de London en términos de la polarizabilidad ¹¹.

Supongamos que en *un cierto instante* un átomo tiene un momento dipolar eléctrico \mathbf{p} , que puede ser no nulo aún si su valor medio fuera cero. El campo eléctrico que genera este momento dipolar en su entorno tiene la siguiente expresión:

$$4\pi\epsilon_0\mathbf{E} = -\nabla\left(\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{r^3}\right) = -\frac{\mathbf{p}}{r^3} + 3\left(\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{r^5}\right)\mathbf{r} \quad (1.27)$$

Este campo actúa sobre un segundo átomo en su vecindad induciendo un momento dipolar eléctrico

$$\mathbf{p}' = 4\pi\epsilon_0 k\mathbf{E}, \quad (1.28)$$

siendo k la *polarizabilidad* del segundo átomo. Este momento inducido, a su vez interactúa con el primero, siendo la energía mutua

$$V = -\mathbf{p}'\cdot\mathbf{E} = -\frac{k}{4\pi\epsilon_0}(1 + 3\cos^2\theta)\frac{p^2}{r^6}, \quad (1.29)$$

donde $\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} = p r \cos\theta$. Así, cualquiera sea la orientación del momento dipolar del primer átomo, la energía potencial de interacción es siempre negativa e inversamente proporcional r^6 , que significa una fuerza atractiva que varía como

¹¹Detalles de este razonamiento pueden consultarse, por ejemplo, en P.W. Atkins and R.S. Friedman, *Molecular Quantum Dynamics*, Oxford University Press (2005) y Soo-Jin Park and Min-Kang Seo, *Interface Science and Composites*, Academic Press (2011)

r^{-7} . Hasta aquí supusimos que el átomo posee un momento dipolar en un instante dado. A pesar de que los átomos no posean un momento intrínseco, vemos que la energía depende de p^2 . Aún en el caso de una distribución de cargas electrónica con simetría esférica, el valor cuadrático medio del momento dipolar puede tomar valores significativos, aunque el valor medio se cancele. Entonces, para cada posición instantánea que adopten los electrones puede generarse un momento dipolar de algún tamaño y orientación, y aunque estos momentos instantáneos fluctúan se promedien rápidamente a cero, su valor cuadrático medio tiene un valor positivo finito.

Este es el modelo de fuerza de interacción de Van der Waals que explica la atracción entre átomos de gases nobles, que poseen capas electrónicas cerradas. Cuando los átomos se acercan lo suficiente como para que sus capas electrónicas se superpongan, el principio de exclusión causa una interacción repulsiva que crece rápidamente al decrecer la distancia internuclear. Estas propiedades fueron resumidas fenomenológicamente en el potencial de J.E. Lennard-Jones (1925), que incluye ambos efectos, a la manera de un potencial efectivo de la forma:

$$V_{LJ}(R) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right] \quad (1.30)$$

Las constantes n , ϵ y σ son parámetros ajustables. Comúnmente, $n = 12$. ϵ es la profundidad del potencial y $V(R = \sigma) = 0$. De acuerdo con la forma del potencial (1.30), se verifica que la distancia de equilibrio R_0 y el parámetro σ cumplen la relación $R_0 = 2^{1/6}\sigma$, por lo que σ es una medida del tamaño de la molécula.

En las moléculas de los átomos de gases nobles la profundidad del potencial es muy pequeña en comparación con las moléculas covalentes o iónicas. Por ejemplo, para los átomos nobles, desde He a Xe, crece el volumen atómico y consistentemente crece la polarizabilidad que depende del volumen. En el mismo sentido, las energías de interacción crecen, desde 8.79×10^{-4} eV hasta 1.94×10^{-2} eV¹². Recordemos que para la molécula de H₂ la profundidad es de aproximadamente 4 eV. Dada la debilidad de la fuerza interatómica, es necesario tener en cuenta la energía de punto cero del pozo de potencial¹³, como la mínima energía. Cuando esta energía es comparable a la profundidad del potencial, podría suceder que aún a temperaturas muy bajas no exista una estructura molecular estable. Por ejemplo, no es factible una molécula estable de He a ninguna temperatura.

¹²E R Dobbs and G O Jones, Rep. Prog. Phys. **20**, 516 (1957)

¹³Es decir $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$, donde la frecuencia ω_0 es la curvatura del potencial en su mínimo.

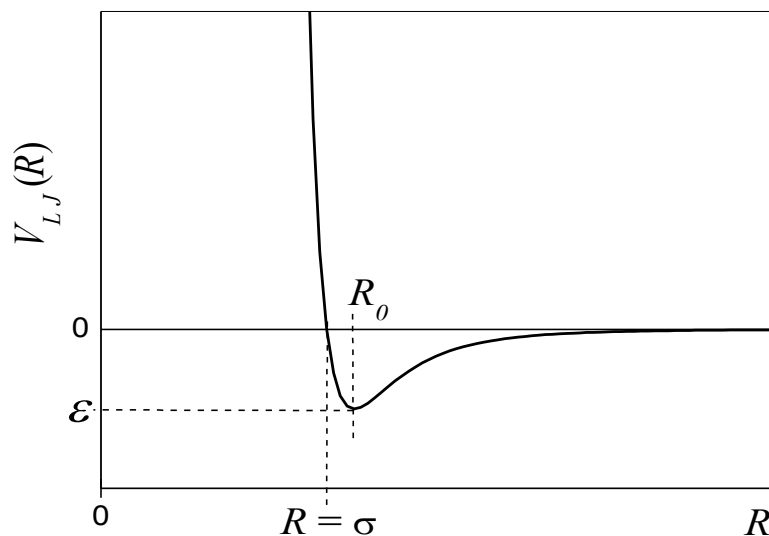


FIGURE 1.7: Potencial de Lennard-Jones.

1.7 Método de combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO)

Un método alternativo al de Heitler-London para aplicar la mecánica cuántica al cálculo de la estructura molecular es el método de orbitales moleculares, desarrollado por Hund, Mulliken y Lennard-Jones (1928). La característica distintiva de este método es que en lugar de comenzar con átomos definidos, se parte de una configuración en que los núcleos en la molécula están en sus posiciones de equilibrio y se considera el efecto de ir agregando gradualmente los electrones en el campo de fuerza resultante. De acuerdo con este principio, así como los electrones en un átomo tienen orbitales definidos caracterizados por números cuánticos n, l, m , y ocupan los niveles de energía más bajos en consistencia con el principio de exclusión de Pauli, en una molécula los electrones tienen *orbitales moleculares* (OM) y números cuánticos definidos¹⁴.

En este esquema se adopta el principio de que los estados electrónicos moleculares pueden ser construidos como expansiones de la función de onda

¹⁴A diferencia de los átomos, en las moléculas diatómicas sólo se conserva la componente del momento angular correspondiente a la dirección de la recta que une los núcleos.

electrónica en una base de orbitales atómicos (OA), y que la configuración electrónica molecular puede ser organizada asignando cada electrón a un orbital molecular, respetando el principio de exclusión de Pauli. Así, los orbitales moleculares que se utilizarán para construir la función de onda multielectrónica son de la forma

$$\psi_{OM} = \sum_r c_r \phi_r, \quad (1.31)$$

donde la suma recorre un conjunto de orbitales atómicos, que se seleccionan en cada caso particular con criterios del tipo de los métodos variacionales, como discutiremos enseguida. Luego, estos OMs se van llenando con electrones, siguiendo el principio de exclusión de Pauli, a la manera de la construcción de las funciones de onda de átomos con muchos electrones. Este procedimiento es conocido por la sigla LCAO-MO (linear combination of atomic orbitals-molecular orbitals), y junto con el concepto de unión covalente, conforman la base teórica de los cálculos computacionales de estructura molecular en la actualidad.

Para construir los OMs en principio se podría intentar usar orbitales atómicos exactos, es decir autofunciones del Hamiltoniano atómico. Sin embargo, en la práctica se adoptan generalmente expresiones aproximadas para los elementos de la expansión (1.31) ya que los OMs exactos no son descriptos por ecuaciones simples, y resultan inconvenientes para las aplicaciones. Es decir, los elementos de la expansión no necesitan ser verdaderos orbitales atómicos. En tal caso, las funciones ϕ_r son 'atómicas' en el sentido de que son funciones de electrón-único centradas en los diferentes núcleos y elegidas principalmente por su potencialidad de proveer un punto de partida flexible para el cálculo, al modo del cálculo variacional. Entonces, el método LCAO construye OMs aproximados directamente de los OAs provenientes del método de Hartree-Fock para los átomos de la molécula, guiado por la simetría molecular y la "intuición química". Así, se proponen OMs aproximados comenzando con funciones de prueba apropiadas que reflejen la simetría de la molécula. Luego, esta propuesta es optimizada mediante cálculos de campo auto-consistente del tipo de Hartree-Fock (similares a los que se aplican en átomos multielectrónicos) para producir los mejores valores de los parámetros ajustables en las funciones de prueba, para ser utilizados en las aplicaciones.

Analicemos primero las ideas básicas del método y más adelante veremos en forma resumida el procedimiento matemático autoconsistente de optimización de los orbitales atómicos. El caso del ion molecular H_2^+ es adecuado como punto de partida para ilustrar las características principales del método LCAO-MO. Precisamente, las funciones ψ_{\pm} de las ecuaciones (1.3) y (1.4) de la sección 1.2 fueron construídas como combinaciones lineales de los orbitales atómicos aproximados ϕ_{1s} del átomo de hidrógeno, en la forma de funciones de prueba

1.7. MÉTODO DE COMBINACIÓN LINEAL DE ORBITALES ATÓMICOS (LCAO)

de un método variacional, guiados por la simetría de la molécula y los comportamientos límite.

Examinemos nuevamente las funciones de onda del electrón en este sistema, y particularmente sus propiedades de momento angular. La función ψ_+ , que es una aproximación de la función de onda exacta, fue construida como una combinación lineal de los OAs del átomo de H, centrados en las posiciones de los núcleos A y B, es decir un OM. Debido al carácter multi-centro, esta función no es autoestado del momento angular L^2 . Vemos que los orbitales moleculares no pueden ser clasificados de acuerdo con los valores del número cuántico l . Sin embargo, en moléculas diatómicas como el H_2^+ , existe simetría cilíndrica, por lo que los OMs resultan ser autoestados de la componente z (el eje molecular) del momento angular, L_z . Los autovalores de L_z en física molecular son denominados por $\lambda\hbar$, con $\lambda = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, y los estados correspondientes son rotulados $\sigma, \pi, \delta, \dots$, para $|\lambda| = 0, 1, 2, \dots$

Entonces, los OMs de menor energía construidos a partir del OA fundamental del H (1s) son las funciones ψ_{\pm} , que pasan a denominarse $\psi_+ \rightarrow \sigma_g(1s)$ (ligante) y $\psi_- \rightarrow \sigma_u(1s)$ (antiligante).

$$\sigma_g(1s) = \phi_{1s}(A) + \phi_{1s}(B) \quad (1.32)$$

$$\sigma_u(1s) = \phi_{1s}(A) - \phi_{1s}(B). \quad (1.33)$$

Llenando el orbital (1.32) con un electrón obtenemos el estado fundamental del H_2^+ .

Avanzando en la complejidad, generalicemos este esquema para tratar la molécula de H_2 usando los OMs construidos a partir del H_2^+ . El estado fundamental del H_2 corresponde a dos electrones en el estado ligante, es decir $(\sigma_g(1s))^2$. Se grafica esta situación en la Fig. 1.8 (a). El siguiente paso es una molécula con tres electrones, es decir helio ionizado, He_2^+ . La configuración es $(\sigma_g(1s))^2(\sigma_u(1s))^1$, es decir dos electrones ligantes y uno antiligante, por lo que se espera una ligadura neta. Esta molécula existe y tiene energía de disociación de 3 eV.

También se pueden combinar OAs de tipo p . Hay tres de este tipo, p_x, p_y, p_z . Veamos ahora casos de OAs de tipo $2p$ que se combinan para formar una molécula, como se ilustra en las Figs. 1.8 (b) y (c). El OM más estable que puede obtenerse es uno en el que el traslape (overlap) a lo largo del eje internuclear es máximo. Con la suma de dos OAs del tipo $2p_x$ se consigue un estado ligante para dos núcleos, A y B alineados en x , $\sigma_g(2p)$. Con la diferencia, se obtiene un OM antiligante, $\sigma_u(2p)$. Estos estados tienen simetría cilíndrica, por lo que tienen momento angular $\lambda = 0$. Este es un ejemplo que ilustra las premisas o principios

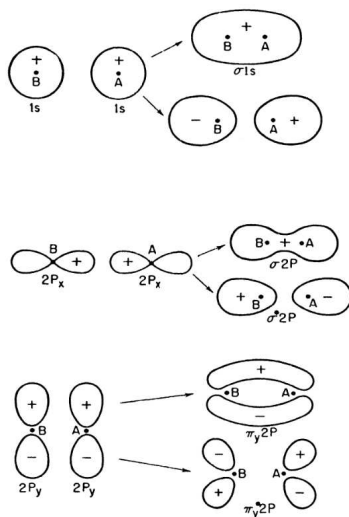


FIGURE 1.8: Formación de orbitales moleculares como combinación de orbitales atómicos.

sobre las que están basados las propuestas de OMs en caso de átomos con más de dos electrones:

- Dos OAs contribuyen significativamente a la formación de ligadura siempre que sus niveles de energía sean muy cercanos. Consecuentemente, se puede ignorar la mezcla entre orbitales internos $1s$ y los orbitales de la capa de valencia $2s$ y $2p$. Similarmente, en general se puede ignorar la mezcla entre los orbitales $2s$ y $2p$.
- Dos OAs de diferentes átomos contribuyen a la formación de ligadura solamente si tienen un traslape significativo ¹⁵

¹⁵La idea de overlap debe ser definida más precisamente para interpretar este enunciado. Dos orbitales se traslapan significativamente si ambos tienen amplitudes apreciables en la misma región del espacio. El traslape neto puede ser de positivo a nulo, dependiendo de las fases relativas de los orbitales involucrados. Los orbitales ligantes surgen de traslape positivo (interferencia constructiva), mientras que orbitales antiligantes resultan de traslape nulo (interferencia destructiva).

1.7. MÉTODO DE COMBINACIÓN LINEAL DE ORBITALES ATÓMICOS (LCAO)

Los OMs formados a partir de OAs perpendiculares al eje internuclear, p_y y p_x , tienen una forma muy distintiva como se muestra en la Fig. 1.8 (c). A medida que los núcleos se aproximan, en el caso ligante los bordes de los orbitales p_y o p_z coalescen interfiriendo positivamente, y finalmente forman dos “corrientes de probabilidad”, una por arriba y otra por debajo del eje internuclear. Estos orbitales moleculares son denominados “enlaces π ”. Notemos que no poseen simetría de rotación alrededor del eje internuclear, y tienen momento angular $\lambda = 1$. Los enlaces π son utilizados para explicar las ligaduras intensas que mantienen unidas moléculas poliatómicas del tipo de los anillos bencénicos.

Finalmente, revisitemos la molécula de H_2 y analicemos su función de onda electrónica ψ_e de acuerdo con el método de orbitales moleculares (LCAO-MO). Este análisis nos permitirá ejemplificar el método en un caso simple, y a la vez nos dará oportunidad de comparar con la función de onda de H-L. En el método de OMs comenzamos con los dos núcleos y agregamos los electrones en el orbital molecular fundamental que construimos como combinación lineal de los OAs fundamentales del átomo de H , como hicimos en el caso del ion H_2^+ al proponer la función ψ_+ (ver ecuación (1.3)) . Si $\phi_{1s}(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}) \equiv \phi_A$ y $\phi_{1s}(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}) \equiv \phi_B$, la función de onda de uno de los electrones en el campo de los núcleos es

$$\psi_1^{OM} = c_1\phi_A(1) + c_2\phi_B(1). \quad (1.34)$$

Similarmente, para el segundo electrón

$$\psi_2^{OM} = c_1\phi_A(2) + c_2\phi_B(2). \quad (1.35)$$

Entonces la función de onda de la molécula (la parte orbital) en este marco teórico es

$$\begin{aligned} \psi_e^{OM} &= \psi_1^{OM}\psi_2^{OM} \\ &= c_1^2\phi_A(1)\phi_A(2) + c_2^2\phi_B(1)\phi_B(2) + c_1c_2[\phi_A(1)\phi_B(2) + \phi_A(2)\phi_B(1)]. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Pot otro lado, en el método de Heitler-London la función de onda es

$$\psi_e^{HL} = \phi_A(1)\phi_B(2) + \phi_A(2)\phi_B(1). \quad (1.37)$$

Comparando las ecuaciones (1.36) y (1.37) notamos que el método de OMs da un gran peso a las configuraciones que ubican ambos electrones sobre un núcleo (componente iónica), mientras que el método de H-L desprecia esos términos. En realidad, para la mayoría de las moléculas el método de OMs sobreestima considerablemente los términos iónicos, mientras que

Heitler-London subestima estas contribuciones. En general, la estructura que mejor describe los experimentos es un compromiso entre los dos extremos.

A partir de la función de onda (1.36) se puede obtener la energía electrónica de la molécula calculando el valor de expectación del Hamiltoniano como en la ecuación (1.23). Como resultado de este cálculo se obtiene para la energía de disociación el valor $E_D = 350$ kJ/mol, apreciablemente menor que el valor experimental $E_D = 430$ kJ/mol. Las mejoras posibles sobre este resultado provienen de procedimientos del tipo de campo autoconsistente de Hartree-Fock, como los que se usan en los átomos multielectrónicos (SCF- self consistent field). En tales métodos, se tiene en cuenta la interacción entre electrones en la forma de un campo medio. Es decir, se resuelve el problema de un electrón en presencia de los núcleos y de un campo efectivo producido por los demás electrones. Finalmente, también se utilizan métodos para tener en cuenta de alguna forma los efectos de la correlación de los electrones¹⁶

1.8 Síntesis del método de campo consistente en moléculas (SCF-MO)

Finalmente, en esta sección presentaremos una síntesis apretada del procedimiento de cálculo autoconsistente, que subyace en el formalismo de OM, con el objeto de exponer las ideas principales del método. La literatura citada a pie de página es suficiente para acceder a los detalles del procedimiento.

Comencemos resumiendo la idea original de campo autoconsistente debida a Hartree^{17 18}. El procedimiento se conoce como el método de *campo autoconsistente-orbitales moleculares* (SCF-MO). Para ilustrar las ideas principales del método autoconsistente, comencemos analizando el ejemplo simple de la dinámica electrónica de un átomo con dos electrones, como el He. Se asume que uno de los electrones, digamos el electrón 1, se mueve en un campo combinado de los núcleos y el electrón 2, considerado como una distribución continua de carga negativa, de densidad $\rho_2(\mathbf{r}) = e|\psi_2(\mathbf{r})|^2$, donde $\psi_2(\mathbf{r})$ es la función de onda que describe el estado del electrón 2. La energía potencial de este campo es

$$V(\mathbf{r}) \equiv V(\psi_2(\mathbf{r})) = -\frac{Ze^2}{r} + e^2 \int d\tau' \frac{|\psi_2(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (1.38)$$

¹⁶P. Atkins and R. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, 4th Ed., Oxford University Press (2005).

¹⁷D.R. Hartree, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* 24, 111 and 426 (1928).

¹⁸S.M. Blinder, *Am. J. Phys.* 33, 431 (1965).

1.8. SÍNTESIS DEL MÉTODO DE CAMPO CONSISTENTE EN MOLÉCULAS (SCF-MO)

donde \mathbf{r} representa la posición instantánea del electrón 1 con respecto al núcleo. Notemos que en la ecuación anterior, el potencial depende de la función de onda del electrón 2. La dinámica del electrón 1 está regida por la ecuación de Schrödinger de una partícula

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\psi_2) \right] \psi_1(\mathbf{r}) = \epsilon_1 \psi_1(\mathbf{r}). \quad (1.39)$$

Razonando análogamente, la ecuación para la partícula 2 es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\psi_1) \right] \psi_2(\mathbf{r}) = \epsilon_2 \psi_2(\mathbf{r}). \quad (1.40)$$

Estas dos ecuaciones acopladas son conocidas como ecuaciones de Hartree, que pueden ser resumidas como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1^{ef} \psi_1(\mathbf{r}) &= \epsilon_1 \psi_1(\mathbf{r}) \\ \mathcal{H}_2^{ef} \psi_2(\mathbf{r}) &= \epsilon_2 \psi_2(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.41)$$

El acoplamiento de estas ecuaciones se debe a que los Hamiltonianos efectivos de cada una de ellas depende de la solución de la otra ecuación. La forma sugerida para resolver este sistema de ecuaciones es un método iterativo de aproximaciones sucesivas, partiendo del cálculo de los potenciales $V(\psi_1)$ y $V(\psi_2)$ mediante funciones de onda de prueba. Luego se resuelven las ecuaciones para ψ_1 y ψ_2 , con las cuales se obtiene potenciales corregidos, y así siguiendo hasta obtener correcciones dentro de la precisión requerida. Se dice que las funciones de onda y los potenciales así obtenidos son autoconsistentes.

Este resultado se generaliza rápidamente al caso de N electrones. Cada electrón se mueve en el campo generado por los otros $N - 1$ electrones. Ahora las ecuaciones son de la forma

$$\mathcal{H}_i^{ef} \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad i = 1 \dots N, \quad (1.42)$$

donde

$$\mathcal{H}_i^{ef} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_i(\psi_1, \psi_2 \dots \psi_N) \quad (1.43)$$

y

$$V_i(\psi_1, \psi_2 \dots \psi_N) = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_{j \neq i} e^2 \int d\tau' \frac{|\psi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (1.44)$$

Esta metodología pudo ser aplicada de forma más o menos directa en el cálculo de las funciones de onda atómicas, donde una aproximación de campo central es

robusta para calcular la parte principal de la solución del problema, sujeto luego a correcciones que introduce la parte no central del potencial.

El análisis formal del procedimiento sugerido por Hartree fue presentado por J.S. Slater y J.A. Gaunt^{19 20}. En este tratamiento, se parte del Hamiltoniano de un sistema de N electrones

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} \right] + \sum_{j>i}^N \sum_{i=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}}. \quad (1.45)$$

La ecuación de Schrödinger para el problema de los N electrones es

$$\mathcal{H}\psi(\mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N) = E\psi(\mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N). \quad (1.46)$$

Slater y Gaunt mostraron que las ecuaciones de Hartree son precisamente las condiciones de optimización de una solución aproximada de la ecuación anterior de forma separable

$$\psi(\mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2) \cdots \psi(\mathbf{r}_N). \quad (1.47)$$

La solución rigurosa de la ecuación de Schrödinger no es separable debido a que las coordenadas electrónicas están acopladas por los términos de repulsión del Hamiltoniano. Mediante métodos variacionales puede encontrarse una solución aproximada del estado fundamental, minimizando el cociente

$$E = \frac{\int \cdots \int d\tau_1 \cdots d\tau_N \psi^* \mathcal{H} \psi}{\int \cdots \int d\tau_1 \cdots d\tau_N |\psi|^2}, \quad (1.48)$$

con la condición de normalización

$$\int d\tau_i |\psi_i(\mathbf{r}_i)|^2 = 1, \quad i = 1 \cdots N. \quad (1.49)$$

Las ecuaciones de Hartree-Fock, que son la base de los cálculos en los sistemas de N electrones, se obtienen a partir del análisis variacional con una función de onda inicial de prueba consistente en un producto de funciones individuales, pero con el requisito de la antisimetrización debido al carácter fermiónico de los electrones. Así, el punto de partida del procedimiento es una función producto simetrizada en forma de determinante de Slater

¹⁹J.S. Slater, *PHys. Rev.* 32, 339 (1928).

²⁰J.A. Gaunt, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* 24, 328 (1928).

$$\Phi(1 \dots N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_2(1) \cdots & \phi_N(1) \\ \phi_1(2) & \phi_2(2) \cdots & \phi_N(2) \\ \vdots & & \\ \phi_1(N) & \phi_2(N) \cdots & \phi_N(N) \end{vmatrix}, \quad (1.50)$$

donde las funciones ϕ se denominan *spin-orbitals*, y tienen por argumento las coordenadas espaciales y la coordenada de espín. De manera sintética, $\phi(x) = \psi(\mathbf{r})\alpha$ ó $\phi(x) = \psi(\mathbf{r})\beta$, donde α y β son los espinores. Finalmente, el análisis variacional conduce a las ecuaciones de Hartree-Fock^{21 22}

$$\left\{ \mathcal{H}_0(1) + \sum_k^N [2J_k(1) - K_k(1)] \right\} \psi_i(1) = \epsilon_i \psi_i(1), \quad (1.51)$$

donde

$$\mathcal{H}_0(1) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \quad (1.52)$$

$$J_k(1) = \int d\tau_2 \psi_k^*(2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_k(2) \quad (1.53)$$

y

$$K_k(1)\psi_i(1) = \left[\int d\tau_2 \psi_k^*(2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_i(2) \right] \psi_k(1). \quad (1.54)$$

Este es un conjunto de ecuaciones acopladas, y por lo tanto la solución del mismo se busca mediante el procedimiento de campo autoconsistente, es decir, a partir de una función de prueba se calculan los coeficientes, con los cuales se corrigen las autofunciones y así sucesivamente.

El término $J_k(1)$ representa la interacción Coulombiana del electrón 1 con el electrón 2 en el orbital ψ_k . El término $K_k(1)$ tiene en cuenta los efectos de correlación de espín. Una vez que el resultado final del procedimiento auto-consistente ha sido establecido, las energías de los orbitales son calculadas multiplicando ambos miembros de (1.51) por $\psi(1)$ e integrando en todo el espacio

$$\epsilon_i = \int d\tau_1 \psi_i^*(1) \mathcal{H}_0 \psi(1) + \sum_k (2J_{ik} - K_{ik}) \quad (1.55)$$

donde

$$J_{ik} = \int d\tau_1 \psi_i^*(1) J_k \psi_i(1) \quad (1.56)$$

²¹M. Weissbluth, *Atoms and Molecules*, Academic Press (1978).

²²P. Atkins and R. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford University Press (2005).

y

$$K_{ik} = \int d\tau_1 \psi_i^*(1) K_k \psi_i(1). \quad (1.57)$$

Entonces la suma en (1.51) representa la energía potencial promedio del electrón 1 debido a la presencia de los otros $N - 1$ electrones.

El método del campo autoconsistente de HF es complejo, aún para el caso de átomos. Sin embargo, la existencia de simetría esférica en los átomos, simplifica notablemente el cálculo. En cambio en las moléculas, la falta de simetría rotacional y la existencia de múltiples centros complica enormemente las posibilidades de cálculo. Para resolver este inconveniente, en el procedimiento de HF se postula desde el principio que los orbitales moleculares pueden ser expresados como combinaciones lineales de orbitales atómicos (LCAO). Este procedimiento es conocido como el método de Roothaan²³. Entonces, se introduce un conjunto de M funciones base θ_j que son los orbitales atómicos, y se expresa cada orbital espacial como una combinación lineal de estas funciones

$$\psi_i(1) = \sum_{\mu} c_{\mu i} \theta_{\mu}, \quad (1.58)$$

donde los coeficientes $c_{\mu i}$ son desconocidos, y deben determinarse mediante el método autoconsistente. Esta sustitución convierte al procedimiento de HF en un problema de manipulación de matrices. Reemplazando (1.58) en la ecuación (1.51), luego de manipulaciones algebraicas se llega a un sistema de ecuaciones algebraicas. Para expresar este sistema de una manera sintética se introdujo una notación compacta para las integrales de dos electrones sobre las funciones base:

$$\langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle \equiv \langle \theta_{\mu}(1)\theta_{\lambda}(2) | \frac{e^2}{r_{12}} | \theta_{\nu}(1)\theta_{\sigma}(2) \rangle, \quad (1.59)$$

en donde la convención es poner funciones referidas al mismo electrón en el mismo ket (bra), y colocar las funciones conjugadas complejas a la izquierda en el bra (ket). Entonces, la definición anterior implica

$$\langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle = \langle \lambda\sigma | \mu\nu \rangle, \quad \langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle = \langle \nu\mu | \sigma\lambda \rangle^* \quad (1.60)$$

Utilizando esta notación, las ecuaciones de HF adquieren la forma

$$\sum_{\mu} (F_{\mu\nu} - \epsilon_i S_{\mu\nu}) c_{\nu i} = 0, \quad (1.61)$$

²³CCJ Roothaan, Rev Mod Phys 23, 69 (1951).

1.8. SÍNTESIS DEL MÉTODO DE CAMPO CONSISTENTE EN MOLÉCULAS (SCF-MO)

donde

$$F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu} + \sum_{\lambda\sigma} P_{\lambda\sigma} \left[\langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle - \frac{1}{2} \langle \mu\sigma | \lambda\nu \rangle \right], \quad (1.62)$$

$$H_{\mu\nu} = \langle \theta_\mu(1) | \mathcal{H}_0(1) | \theta_\nu(1) \rangle, \quad (1.63)$$

donde ahora $\mathcal{H}_0(1)$ incluye la suma de las interacciones coulombianas de un electrón con todos los núcleos

$$\mathcal{H}_0(1) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \sum_{\alpha} \frac{Ze^2}{r_{1\alpha}}. \quad (1.64)$$

Además, introducimos la integral de overlap

$$S_{\mu\nu} \equiv \langle \psi_\mu | \psi_\nu \rangle \equiv \int d\tau_1 \psi_\mu^*(1) \psi_\nu(1) \quad (1.65)$$

y la matriz

$$P_{\mu\nu} = 2 \sum_i c_{\mu i}^* c_{\nu i}. \quad (1.66)$$

Las ecuaciones (1.61) son conocidas como *ecuaciones de Hartree-Fock-Roothaan*. Nuevamente, este sistema no puede ser resuelto directamente porque los elementos de matriz dependen de su propia solución (a través de los orbitales). Entonces debe apelarse a un procedimiento autoconsistente (método SCF-MO - self consistent field molecular orbital), partiendo de una combinación de orbitales atómicos de prueba, adecuada con la simetría de la molécula. En cada iteración del procedimiento autoconsistente se consigue un nuevo conjunto de coeficientes $c_{\mu i}$, continuándose hasta alcanzar un criterio de convergencia.

CAPÍTULO 2

ENERGÍAS DE MOLÉCULAS DIATÓMICAS. ESPECTROS ROTACIONALES Y VIBRACIONALES

Hasta ahora hemos discutido cualitativamente algunas características mecánico-cuánticas de la estructura electrónica que dan lugar a la existencia de una molécula estable. Ahora nos planteamos discutir de forma semi-cuantitativa otro aspecto de la física molecular, cual es el movimiento de los núcleos, en base a nuestro análisis anterior sobre estructura molecular.

Vimos que en el esquema de la hipótesis de BO, la dinámica de los electrones genera un potencial que presenta un mínimo como función de la distancia internuclear. En esta visión, podemos describir la dinámica molecular en términos de fluctuaciones de la distancia y rotaciones de la molécula como un todo. Aprovechando la notable diferencia de las energías asociadas con ambos tipos de movimiento, asumiremos en un primer paso que el aspecto principal de la dinámica consiste en vibraciones y rotaciones moleculares desacoplados entre sí, y luego consideraremos los efectos principales del acople entre ambos tipos de movimientos.

Dentro de esta estrategia, partamos de la ecuación de Schrödinger para los grados de libertad relativos de dos núcleos de masas M_1 y M_2 , separados una distancia R . Para describir el movimiento de los núcleos es conveniente separar el movimiento del centro de masa y los movimientos relativos. El Hamiltoniano

de los núcleos se escribe

$$H(\mathbf{R}_N) = H_{CM} + H_{rel} , \quad (2.1)$$

y la función de onda entonces es

$$\Psi(\mathbf{R}_N) = \psi_{CM} v_{rel} . \quad (2.2)$$

Dejando de lado el movimiento del centro de masa, nos enfocamos en el movimiento relativo. La ecuación de Schrödinger que satisface v_{rel} es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} R^2 \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\Lambda^2}{R^2} \right) + V(R) \right] v_{rel}(R, \theta, \phi) = E v_{rel}(R, \theta, \phi) , \quad (2.3)$$

donde R, θ, ϕ son las coordenadas esféricas del vector internuclear \mathbf{R} , $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$ es la masa reducida y Λ^2 es el operador angular

$$\Lambda^2 \equiv \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} , \quad (2.4)$$

que es proporcional al operador momento angular de la rotación molecular alrededor de un eje perpendicular a \mathbf{R} ,

$$L^2 = -\hbar^2 \Lambda^2 . \quad (2.5)$$

$V(R)$ es el potencial efectivo que proviene de la dinámica electrónica calculado para las configuraciones nucleares fijas, en un dado estado electrónico (ver Apéndice).

El problema de potencial central representado por la ecuación (2.3) admite una solución separable de la forma

$$v_{rel}(R, \theta, \phi) = F(R) Y_{lm}(\theta, \phi) . \quad (2.6)$$

El operador angular satisface la ecuación de autovalores

$$\Lambda^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm} , \quad (2.7)$$

donde Y_{lm} son los armónicos esféricos y $l = 0, 1, 2, \dots$ y $m = -l, \dots, l$. Por su parte, la función radial satisface la ecuación

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} R^2 \frac{d}{dR} - \frac{l(l+1)}{R^2} \right) + V(R) \right] F(R) = E F(R) . \quad (2.8)$$

Finalmente, definiendo la nueva función $\chi(R) \equiv RF(R)$, es directo comprobar que ésta satisface la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\chi}{dR^2} + \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R^2} + V(R) \right] \chi(R) = E\chi(R). \quad (2.9)$$

Hasta aquí estamos considerando que el momento angular total de la molécula se debe a la rotación de los núcleos. Sin embargo, los electrones que conforman la ligadura molecular también contribuyen al momento angular total. Consideraremos solamente el caso de momento angular electrónico cero ¹.

El término entre corchetes de la ecuación (2.9) puede ser interpretado como un potencial efectivo $U_l(R)$, en el que la contribución centrífuga dependiente del número cuántico l se suma a la energía potencial de la ligadura electrónica

$$U_l(R) \equiv \left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R^2} + V(R) \right]. \quad (2.10)$$

Entonces, (2.9) es una ecuación unidimensional para la variable lineal R , con una energía potencial que depende del aspecto rotacional del estado de la molécula.

En la Figura 2.1 se puede apreciar una característica importante de la dependencia paramétrica de $U_l(R)$ con l . Allí se observa que para un rango acotado de valores pequeños del momento angular, la forma del potencial efectivo cambia muy poco respecto a U_0 , sobre todo en la región próxima al mínimo, donde las curvas se mantienen aproximadamente paralelas entre ellas con su mínimo en $R \sim R_0$. Para pequeñas amplitudes del movimiento nuclear, la región de los potenciales efectivos cercanas a R_0 pueden ser interpretadas como potenciales armónicos. El efecto de aumentar l se traduce en levantar ligeramente la energía de ligadura (fondo del pozo) sin deformación de la curva. Esto equivale a pensar que la variación de l no modifica el aspecto vibracional de la molécula. Esta característica, provee sustento a la hipótesis “roto-vibracional” que consiste en considerar los dos grados de libertad como independientes, es decir la vibración a lo largo de la ligadura separada de la rotación de cuerpo rígido. Así es que cuando las oscilaciones de la distancia internuclear son de pequeña amplitud, es de esperar que la solución de la ecuación (2.9) con $R \rightarrow R_0$ resulte una buena aproximación. Así, la cantidad

$$E_{rot}^l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_0^2} \quad (2.11)$$

es la energía rotacional de la molécula como un cuerpo rígido, de momento angular $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$, y la ecuación de Schrödinger puede escribirse en la forma

¹El caso de momento angular electrónico no nulo se discute en las guías de ejercitación

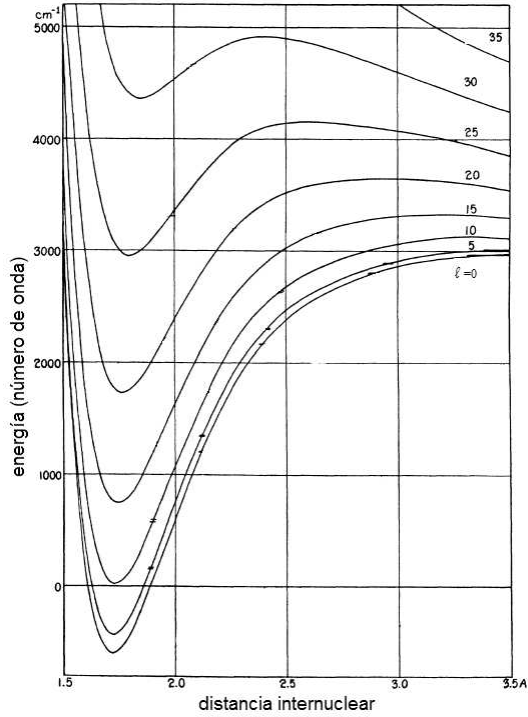


FIGURE 2.1: Variación del potencial efectivo en función del número cuántico del momento angular.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\chi}{dR^2} + V(R)\chi(R) = (E - E_{rot}^l)\chi(R) = E_{vib}\chi(R). \quad (2.12)$$

Es decir, en esta aproximación el aspecto angular del estado de la molécula no altera la dinámica radial, y ambos grados de libertad se consideran separadamente,

$$E = E_{rot}^l + E_{vib}. \quad (2.13)$$

En consistencia con esta aproximación, la parte vibracional de la energía se describe por el término cuadrático del desarrollo de $V(R)$ alrededor de R_0 , y la energía de la molécula se aproxima por:

$$E_{v,l} = -D_e + \hbar\omega_0\left(v + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_0^2}, \quad (2.14)$$

donde llamamos D_e al mínimo de la energía potencial, ω_0 a la frecuencia en la aproximación armónica y $v = 0, 1, 2 \dots$. Notemos que en la ecuación (2.14) $E_{rot}^l \ll E_{vib}$, es decir que la contribución centrífuga de la energía cinética solo perturba levemente a la energía electrónica cuando l es suficientemente pequeño. Por ejemplo, en la molécula de O_2 , la energía vibracional es del orden $\hbar\omega_0 = 2 \times 10^{-1}$ eV, mientras que $\frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} = 7 \times 10^{-3}$ eV. De acuerdo con la diferencia apreciable entre las escalas de energías, los niveles $E_{v,l}$ presentan características de bandas de niveles vibracionales, ensanchados por la perturbación rotacional. Los espectros de las moléculas diatómicas reflejan globalmente este modelo "ideal" representado por la ecuación (2.14).

Esta aproximación pierde exactitud a medida que consideramos estados de mayor momento angular y mayor amplitud de vibración. Las distancias entre niveles $E_{v+1,l'} - E_{v,l}$ disminuye para valores crecientes de la energía, y los efectos del acople de rotación y vibración se vuelven claramente visibles en los espectros observados. Debido a esto, para una descripción más ajustada de los espectros se deben considerar correcciones de la ecuación (2.14), necesarias para contemplar el acople entre ambos grados de libertad y la anarmonicidad del potencial $V(R)$.

El procedimiento seguido generalmente para estudiar correcciones a los niveles (2.14) está basado en el uso de un potencial electrónico analítico, construido fenomenológicamente, con el que se pueda encontrar soluciones de la ecuación de Schrödinger. Morse propuso una expresión para el potencial (vibracional) $V(R)$ de la forma ²

$$V_M(R) = D_e \left[e^{-2a(R-R_0)} - 2e^{-a(R-R_0)} \right] \quad (2.15)$$

que posee las propiedades requeridas para representar adecuadamente el potencial real para un rango amplio de valores de R , y por otro lado es lo suficientemente simple como para encontrar las autofunciones y autovalores en forma cerrada.

En particular, $V_M(R)$ tiende a cero en el infinito de manera exponencial, como en el caso del potencial de la ligadura covalente (recordemos el ion molecular hidrógeno), y la parte repulsiva también tiene dependencia exponencial. El hecho de que no diverge en el origen (lo cual se esperaría para un potencial repulsivo) es un problema menor para las aplicaciones. Este potencial tiene un número finito de niveles discretos para valores de v en el rango $0 \leq 2v \leq \frac{2(\mu D_e)^{1/2}}{a\hbar} - 1$. El coeficiente D_e del potencial es la energía de disociación, y el coeficiente a se expresa en términos de D_e , μ y ω_0 exigiendo que para R pequeños el potencial coincida con la aproximación de oscilador

²P. Morse, Phys. Rev. 34, 57 (1929)

armónico (μ es la masa reducida y ω_0 la frecuencia del oscilador armónico). Estos coeficientes se determinan experimentalmente mediante espectroscopía rotacional y vibracional.

La ecuación de Schrödinger con el potencial de Morse puede ser resuelta en forma cerrada si se ignora la rotación ($l = 0$). Los autovalores de la energía (vibracional) son:

$$E_{v,l=0} = -D_e + \hbar\omega_0\left(v + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{4D_e} \left[\hbar\omega_0\left(v + \frac{1}{2}\right) \right]^2. \quad (2.16)$$

Al considerar la rotación, la ecuación (2.9) es la ecuación de Schrödinger lineal con un potencial efectivo

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\chi}{dR^2} + U_{ef} \chi(R) = E\chi(R), \quad (2.17)$$

con

$$U_{ef}^l = D_e \left[e^{-2a(R-R_0)} - 2e^{-a(R-R_0)} \right] + \frac{B(l)}{R^2}, \quad (2.18)$$

donde

$$B(l) \equiv \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R^2}. \quad (2.19)$$

La ecuación (2.17) no tiene solución cerrada cuando $l \neq 0$, por lo que debe aplicarse un procedimiento aproximado.

Un método propuesto por Morse en su trabajo de 1929, consiste en desarrollar U_{ef}^l alrededor de su mínimo y luego interpretar los coeficientes de ese desarrollo como los coeficientes de un "nuevo" potencial de Morse, $V_M^{(l)}$ (como el de la ecuación (2.15) pero con coeficientes D_e y R_0 "renormalizados" de acuerdo con la dependencia con el número cuántico l).

Con otro procedimiento alternativo, similar al anterior presentado en un trabajo más reciente, se llega a los mismos resultados que obtuvo Morse³. El procedimiento propuesto consiste en hallar el mínimo de la función (2.18) para $l \neq 0$, para obtener la nueva separación internuclear de equilibrio, R_0^l

$$R_0^l = R_0 \left(1 + \frac{B(l)}{a^2 R_0^2 D_e} \right). \quad (2.20)$$

Este valor luego es usado para evaluar la profundidad del potencial efectivo,

$$D_e^l = D_e - B \left[1 - \frac{1}{a^2 R_0^2} \left(\frac{B(l)}{D_e} \right) \right], \quad (2.21)$$

³C.E. Burkhardt and J.J. Leventhal, Am. J. Phys. 75, 686 (2007)

que se interpreta como el coeficiente de amplitud D_e^l de un nuevo potencial de Morse.

En ambos procedimientos, una vez definidas la nueva posición del mínimo y la profundidad del potencial, para cada valor de l (D_e^l), se deduce la expresión para la energía partiendo de (2.16), en donde se realiza la sustitución $D_e \rightarrow D_e^l$. Así, se obtiene la siguiente expresión corregida para las energías de la molécula diatómica :

$$E_{v,l} = -D_e + \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0 \left[1 - \frac{1}{4D_e} \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0\right] - \left(\frac{l(l+1)\hbar^2}{4\mu R_0^2 D_e}\right) \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R_0^2} \left[1 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu^2 R_0^2 \omega_0^2}\right]. \quad (2.22)$$

En este resultado, notamos que el último término contiene una contribución a la energía rotacional pura que puede ser interpretado como un “efecto centrífugo” que produce el estiramiento de la molécula. El tercer término refleja el acople vibro-rotacional. Finalmente, el segundo término contiene la corrección de la dinámica vibracional debido a la anarmonicidad del potencial. Expresiones de este tipo se usan actualmente para interpretar los espectros rotacionales y vibro-rotacionales.

2.1 Reglas de selección

Para interpretar los espectros de radiación moleculares, es necesario conocer cuáles son las transiciones posibles entre los distintos niveles de energía molecular. Tales transiciones son provocadas por una perturbación a los estados moleculares. Consideraremos como origen de la perturbación (dependiente del tiempo) a la interacción del sistema de cargas eléctricas de la molécula con un campo eléctrico circundante.

Realizaremos el análisis dentro de la aproximación dipolar, en la que la perturbación es proporcional al producto del campo eléctrico externo y el momento dipolar de la molécula. Esta aproximación describe las transiciones más intensas, pero cuando por alguna regla de selección una transición no contribuye a la absorción o emisión de radiación dipolar, otros tipos de transiciones, como dipolares magnéticas o cuadrupolares eléctricas pueden estar presentes, aunque con intensidades mucho menores que las dipolares eléctricas. Entonces, la probabilidad de transición por unidad de tiempo desde un estado molecular a otro es proporcional al elemento de matriz del momento dipolar eléctrico entre dichos estados.

2.1. REGLAS DE SELECCIÓN

En el marco de la aproximación de Born-Oppenheimer, la función de onda molecular estacionaria se expresa como un producto de funciones de onda electrónica y nuclear

$$\psi = \psi_{el} \psi_N. \quad (2.23)$$

Nos ocuparemos solamente de las transiciones que ocurren sin cambio del estado electrónico. En este caso, debemos analizar el elemento de matriz del operador momento dipolar eléctrico molecular $\hat{\mathbf{d}}$,

$$\langle \psi | \hat{\mathbf{d}} | \psi' \rangle = \int \int \psi_{el} \psi_N \hat{\mathbf{d}} \psi'_{el} \psi'_N d\tau_{el} d\tau_N, \quad (2.24)$$

que podemos escribir también como

$$\langle \psi | \hat{\mathbf{d}} | \psi' \rangle = \int \psi_N \psi'_N \left[\int \psi_{el} \hat{\mathbf{d}} \psi_{el} d\tau_{el} \right] d\tau_N, \quad (2.25)$$

donde la cantidad entre corchetes es el vector *momento dipolar medio* \mathbf{d} que corresponde al estado electrónico ψ_{el} , y que depende de la configuración nuclear. La simetría impone que \mathbf{d} esté alojado en el eje internuclear, es decir

$$\mathbf{d} = \mathbf{i} d \cos \theta_N \cos \phi_N + \mathbf{j} d \cos \theta_N \sin \phi_N + \mathbf{k} d \sin \theta_N, \quad (2.26)$$

donde θ_N y ϕ_N son los ángulos polar y azimutal de la dirección del eje molecular. La magnitud del vector momento dipolar eléctrico depende de la distancia internuclear, $d = d(R)$. Entonces, la integral (2.25) es

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty \psi_N \psi'_N \mathbf{d} R^2 \sin \theta_N d\phi_N d\theta_N dR. \quad (2.27)$$

La función ψ_N corresponde a la función separable (2.6)

$$\psi_N(R, \theta_N, \phi_N) = \frac{\chi(R)}{R} Y_{lm}(\theta_N, \phi_N),$$

por lo que la integral (2.27) adopta la forma

$$\int_0^\infty \chi(R) \chi'(R) d(R) dR \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}(\theta_N, \phi_N) Y_{l'm'}^*(\theta_N, \phi_N) (\mathbf{i} \cos \theta_N \cos \phi_N + \mathbf{j} \cos \theta_N \sin \phi_N + \mathbf{k} \sin \theta_N) \sin \theta_N d\phi_N d\theta_N, \quad (2.28)$$

donde $d(R)$ es el módulo del vector momento dipolar medio, que depende de la distancia internuclear R . Debido a la simetría de las funciones $Y_{lm}(\theta_N, \phi_N)$, hay

contribuciones de las integrales angulares de la ecuación anterior solamente para los casos particulares ⁴

$$\Delta l = \pm 1 \quad ; \quad \Delta m = 0, \pm 1.$$

Ahora analicemos la integral sobre la variable R en la ecuación (2.28). Para avanzar con el cálculo deberíamos conocer la dependencia del momento dipolar con la distancia internuclear, $d(R)$. Notemos en primer lugar que en las moléculas homonucleares, el momento dipolar es nulo para todo R , por lo que en este caso no hay transiciones dipolares eléctricas sin cambio de estado electrónico.

En moléculas heteronucleares, debemos considerar la función $d(R)$. Los detalles de esta función no son, en general, bien conocidos, sin embargo podemos analizar sus comportamientos en los límites. Para $R \rightarrow 0$, $d(R) \rightarrow 0$, ya que esta situación correspondería a la de un átomo neutro único. El otro extremo, $R \rightarrow \infty$, corresponde a una molécula disociada. En la mayoría de los casos la disociación culmina en dos átomos neutros, por lo que también en este límite $d(R) \rightarrow 0$. Cualitativamente, la función $d(R)$ tendrá un máximo para una separación mayor a la de equilibrio, $R > R_e$. ⁵

Para continuar con el análisis de las reglas de selección, expresemos la dependencia del momento dipolar en la forma de una expansión de Taylor alrededor de la distancia de equilibrio. Definiendo la variable $q \equiv R - R_e$ ($-R_e < q < \infty$), expandimos $d(q)$ alrededor de $q = 0$

$$d(q) = d(0) + d'(0) q + \frac{1}{2} d''(0) q^2 + \dots \quad (2.29)$$

Sustituyendo esta expresión en la integral radial de (2.28), resultan las contribuciones

$$d(0) \int_{-\infty}^{\infty} \chi_v(q) \chi_{v'}(q) dq + d'(0) \int_{-\infty}^{\infty} q \chi_v(q) \chi_{v'}(q) dq + \frac{1}{2} d''(0) \int_{-\infty}^{\infty} q^2 \chi_v(q) \chi_{v'}(q) dq + \dots \quad (2.30)$$

Notar que en (2.30) extendimos el límite inferior a $-\infty$ bajo la suposición de que las autofunciones adoptan un valor muy bajo para $q < -R_e$. También hemos sustituido el símbolo $\chi(R)$ por las autofunciones χ_v , rotuladas por el número cuántico v . Debido a la ortogonalidad de las autofunciones $\chi_v(q)$, la

⁴Las mismas reglas de selección también están presentes en las transiciones electrónicas atómicas, inducidas y espontáneas, debido a la interacción del átomo con la radiación electromagnética.

⁵Se puede ampliar sobre estas consideraciones en los textos: W.S. Struve, *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, Wiley (1989); I.N. Levine, *Molecular Spectroscopy*, Wiley (1975).

2.1. REGLAS DE SELECCIÓN

primera integral de (2.30) es no nula siempre que $v = v'$ (el mismo estado vibracional), contribuyendo así a las transiciones rotacionales puras. Analicemos la segunda integral en la aproximación que considera al potencial electrónico como un oscilador armónico. Este término es no nulo cuando

$$\Delta v = \pm 1,$$

es decir que corresponde al espectro vibro-rotacional.

Si se utiliza un potencial electrónico más realista de manera de incluir la anarmonicidad, serán también posibles transiciones con saltos vibracionales $\Delta v = \pm 2, \pm 3, \dots$, aunque de baja intensidad comparadas con las que corresponden a $\Delta v = \pm 1$.

Entonces, de acuerdo con estas reglas de selección, podemos observar transiciones entre estados rotacionales para un estado vibracional dado (generalmente el fundamental, $v = 0$) (espectro rotacional puro) y también transiciones entre dos estados vibracionales contiguos para estados con diferentes números de momento angular (espectro roto-vibracional). En la Figura 2.2 se representan los niveles de energía rotacionales descriptos en la ecuación (2.11), y un esquema del espectro de absorción con sus líneas equiespaciadas.

Las transiciones que deberían observarse en un espectro de absorción roto-vibracional, en la aproximación de desacople de los movimientos rotacionales y vibracionales, tienen frecuencias que están dadas por las ecuaciones:

$$l \rightarrow l + 1 \quad h\nu_R = \hbar\omega_0 + 2B(l + 1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (2.31)$$

y

$$l \rightarrow l - 1 \quad h\nu_R = \hbar\omega_0 - 2Bl \quad l = 1, 2, \dots \quad (2.32)$$

donde $B \equiv \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2}$ y ω_0 es la frecuencia del potencial armónico usado en la aproximación rotovibracional. En la Figura (2.3) se muestra un esquema de las transiciones rotovibracionales correspondientes a absorción desde el estado vibracional fundamental $v = 0$ al primer estado excitado $v = 1$, con saltos asociados a los niveles rotacionales $l \rightarrow l + 1$ (rama R) y $l \rightarrow l - 1$ (rama P).

El esquema corresponde a un espectro de frecuencias roto-vibracional ideal. En él se observa como característica importante que la línea asociada con la

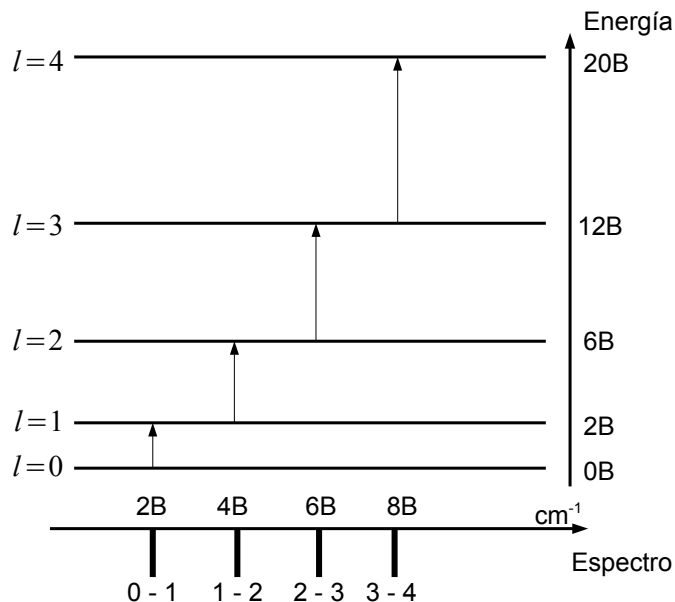


FIGURE 2.2: Espectro rotacional puro.

frecuencia ω_0 está ausente. Esto se debe a que las reglas de selección prohíben los saltos con $\Delta l = 0$, y además las transiciones con $l \rightarrow l - 1$ comienzan desde $l = 1$.

Finalmente, en la Figura (2.4) se observa un espectro real, donde se puede apreciar que los picos de absorción ya no están equiespaciados, debido a los términos de acople entre los grados de libertad rotacional y vibracional, presentes en las energías moleculares. También se observa que las intensidades de los picos están moduladas, debido a los efectos térmicos asociados con la degeneración de los niveles rotacionales⁶

⁶El efecto térmico puede describirse fácilmente calculando las poblaciones de los niveles del rotador cuántico. Ver por ejemplo el texto de M. Weissbluth, *Atoms and Molecules*, Academic Press (1978).

2.1. REGLAS DE SELECCIÓN

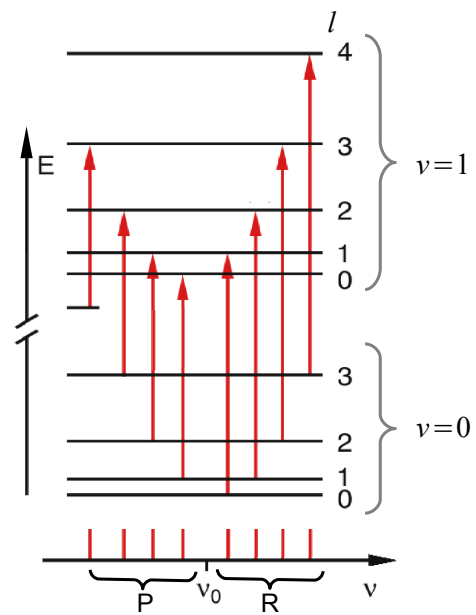


FIGURE 2.3: Esquema de los niveles de energía y las transiciones permitidas correspondientes a un espectro vibro-rotacional ideal.

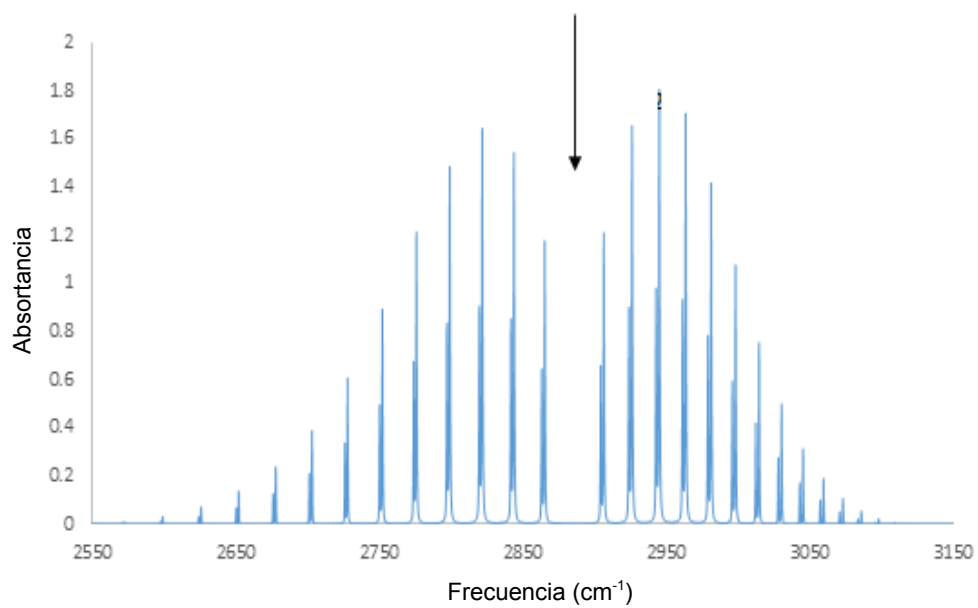


FIGURE 2.4: Espectro vibrorotacional típico de una molécula diatómica. La flecha indica la ausencia de la línea correspondiente a la transición entre estados con energías que difieren en $\hbar\omega_0$

2.2 Apéndice

En esta sección se presentan de manera resumida las ideas principales en que se basa la hipótesis conocida como aproximación de Born-Oppenheimer (BO). Al final del capítulo se sugieren algunas lecturas que permiten poner en foco la importancia de las ideas y sus limitaciones.

El Hamiltoniano total de una molécula, escrito en forma sintética es de la forma

$$H = \sum_N T_N + \sum_n T_n + V(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N), \quad (2.33)$$

donde T_N es la energía cinética del N -ésimo núcleo, T_n es la energía cinética del n -ésimo electrón, y $V(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N)$ es la energía potencial del sistema expresada como función de las coordenadas electrónicas (\mathbf{r}_n) y nucleares (\mathbf{R}_N). La energía potencial incluye los términos de repulsión $e-e$, repulsión nuclear $N-N$ y atracción $e-N$.

La aproximación de (BO) se inspira en la idea clásica de que debido a la gran diferencia de masa entre núcleos y electrones, estos últimos tienen una gran velocidad relativa, lo que les permitiría adaptar su movimiento a las diferentes configuraciones nucleares a medida que los núcleos se desplazan lentamente. En este esquema se imagina a los núcleos moviéndose en un *campo medio* producido por los electrones en su movimiento rápido.

Para visualizar de qué manera estas características podrían estar contenidas en una descripción cuántica, comencemos escribiendo el Hamiltoniano (2.33) en la forma

$$H = \sum_N T_N + H_{el}, \quad (2.34)$$

con

$$H_{el} \equiv \sum_n T_n + V(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N). \quad (2.35)$$

El término H_{el} depende paramétricamente de las posiciones nucleares \mathbf{R}_N , y por lo tanto, así lo harán sus autofunciones y autovalores, $\psi_\lambda(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N)$ y $\epsilon_\lambda(\mathbf{R}_N)$ respectivamente, que satisfacen la ecuación

$$H_{el} \psi_\lambda(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N) = \epsilon_\lambda(\mathbf{R}_N) \psi_\lambda(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N), \quad (2.36)$$

para cada configuración de los núcleos $\{\mathbf{R}_N\}$.

Como H_{el} y H no conmutan, no poseen un conjunto de autofunciones comunes, sin embargo cualquier autofunción $\Psi(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N)$ de H puede ser expandida en términos de las autofunciones de H_{el} en la forma

$$\Psi(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N) = \sum_{\lambda} v_{\lambda}(\mathbf{R}_N) \psi_{\lambda}(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N), \quad (2.37)$$

donde los 'coeficientes' v_{λ} de la expansión son funciones de \mathbf{R}_N .

Luego de sustituir la forma (2.37) para la función de onda $\Psi(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N)$ en la ecuación de Schrödinger

$$H\Psi = E\Psi, \quad (2.38)$$

y utilizando la propiedad de ortonormalidad de las funciones $\psi_{\lambda}(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N)$, se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones acopladas para las funciones $v_{\lambda}(\mathbf{R}_N)$ ⁷:

$$\left\{ \sum_N T_N + \epsilon_{\lambda}(\mathbf{R}_N) - E \right\} v_{\lambda}(\mathbf{R}_N) + \sum_{\lambda'} C_{\lambda\lambda'} v_{\lambda'}(\mathbf{R}_N) = 0, \quad (2.39)$$

donde

$$C_{\lambda\lambda'} \equiv A_{\lambda\lambda'} + \sum_N \mathbf{B}_{\lambda\lambda'}^N \cdot \nabla_N, \quad (2.40)$$

$$A_{\lambda\lambda'} \equiv \langle \psi_{\lambda} | \sum_N T_N | \psi_{\lambda'} \rangle_r \quad (2.41)$$

y

$$\mathbf{B}_{\lambda\lambda'}^N \equiv -\left(\frac{\hbar^2}{M_N}\right) \langle \psi_{\lambda} | \nabla_N | \psi_{\lambda'} \rangle_r. \quad (2.42)$$

En las ecuaciones anteriores M_N es la masa del N -ésimo núcleo y el símbolo $\langle \rangle_r$ significa integración sobre las variables electrónicas \mathbf{r}_n .

La expansión (2.37) contiene infinitos términos, en principio. Mientras el desarrollo (2.37) se puede realizar utilizando cualquier conjunto completo, el uso de las soluciones $\psi_{\lambda}(\mathbf{r}_n, \mathbf{R}_N)$ está motivado en la expectativa de que conservar un único término de la expansión permitirá una descripción aceptable.

Una aproximación, denominada *adiabática* consiste en conservar un solo término de la suma, es decir aproximar la solución por un producto de funciones. Se denomina *no adiabática* a una aproximación en la que se conservan varios términos.

Para visualizar mejor el significado de la aproximación adiabática, escribamos nuevamente la ecuación (2.39) separando los términos diagonales y no diagonales de los operadores $C_{\lambda\lambda'}$, es decir

⁷V.K. Deshpande and J. Mahanty, Am. J of Phys. 37 823 (1969)

$$\left\{ \sum_N T_N + \epsilon_\lambda(\mathbf{R}_N) + C_{\lambda\lambda} - E \right\} v_\lambda(\mathbf{R}_N) + \sum_{\lambda' \neq \lambda} C_{\lambda\lambda'} v_{\lambda'}(\mathbf{R}_N) = 0. \quad (2.43)$$

La aproximación adiabática resulta entonces en una única ecuación,

$$\left\{ \sum_N T_N + \epsilon_\lambda(\mathbf{R}_N) + C_{\lambda\lambda} - E \right\} v_\lambda(\mathbf{R}_N) = 0. \quad (2.44)$$

Es fácil verificar que los coeficientes diagonales $B_{\lambda\lambda}^N$ de (2.40) son nulos, por lo que $C_{\lambda\lambda}$ es una función de \mathbf{R}_N (no depende del momento),

$$C_{\lambda\lambda} = A_{\lambda\lambda} \equiv \langle \psi_\lambda | \sum_N T_N | \psi_\lambda \rangle_r. \quad (2.45)$$

Así, puede interpretarse que en la aproximación adiabática la dinámica de los núcleos evoluciona en un *potencial efectivo* $\epsilon_\lambda(\mathbf{R}_N) + C_{\lambda\lambda}$, al que contribuye principalmente la energía de los electrones correspondiente a la configuración nuclear fija, a la que se agrega una corrección asociada con el valor medio de la energía cinética de los núcleos en el estado electrónico con núcleos fijos. En este caso, se interpreta a v_λ como la función de onda nuclear.

Finalmente, si en la condición adiabática se asume además que $C_{\lambda\lambda} = 0$, la hipótesis recibe el nombre de aproximación de Born-Oppenheimer. Los potenciales efectivos que se muestran en la Figura (1.3) ilustran el resultado de un cálculo realizado bajo estas hipótesis.

Es importante notar que la aplicabilidad de la aproximación adiabática y la de BO se basa esencialmente en la validez de asumir que los términos no diagonales despreciados en la ecuación (2.44) no influyen apreciablemente. En principio, al cumplimiento de esta condición contribuye la pequeñez de estos términos en general. Sin embargo, si los estados electrónicos ψ_λ generan una mezcla apreciable de los operadores de energía cinética y momento nucleares en la matriz $C_{\lambda\lambda'}$, la aproximación puede dejar de ser válida. En efecto, se puede ver que

$$\langle \psi_\lambda | \nabla_N | \psi_{\lambda'} \rangle_r = \frac{\langle \psi_\lambda | [\nabla_N, H_{el}] | \psi_{\lambda'} \rangle_r}{\epsilon_{\lambda'}(\mathbf{R}_N) - \epsilon_\lambda(\mathbf{R}_N)}, \quad (2.46)$$

por lo que en caso de superficies de energía potencial efectivas (curvas en el caso de moléculas diatómicas) muy próximas, es decir cuando $\epsilon_{\lambda'}(\mathbf{R}_N) \simeq \epsilon_\lambda(\mathbf{R}_N)$, o en el caso de cruces, uno o más términos de $C_{\lambda,\lambda'}$ pueden volverse muy grandes y la aproximación deja de ser válida.

Resumiendo, la aproximación o hipótesis de Born-Oppenheimer es la aproximación más restrictiva de un conjunto de aproximaciones sucesivas, basadas en considerar que la molécula es un ensamble de núcleos y electrones, cuyas propiedades estructurales y dinámicas pueden ser entendidas en muy buen grado considerando a la energía cinética nuclear como una pequeña perturbación a la energía de los electrones correspondiente a un problema de núcleos fijos. Esta conjetura surge de una idea clásica basada en la diferencia de masa entre núcleos y electrones. Así, se asume que la función de onda de la molécula es un producto de una función de onda electrónica calculada en una configuración nuclear fija y una función nuclear que representa la dinámica de los núcleos en un campo efectivo provisto por la energía electrónica para cada configuración nuclear. Se llega a este resultado luego de proponer una función total producto y descartar las derivadas con respecto a las variables nucleares de la función electrónica.

En un siguiente paso (aproximación adiabática) se sigue aproximando (2.37) por un único término, pero se levanta la restricción acerca de la 'separabilidad' de la energía cinética nuclear, es decir se deja de suponer que la energía cinética nuclear no influye sobre la dinámica electrónica. Con esto se obtiene un agregado a la aproximación de BO que consiste en una corrección al campo efectivo que ven los núcleos, proveniente de la acción de la energía cinética nuclear sobre las funciones electrónicas. Este paso está justificado cuando la mezcla de las funciones del desarrollo (2.37) producida por la energía y el momento nucleares es despreciable. Por último, cuando la condición anterior no se justifica, deben incluirse los elementos no-diagonales en (2.39), obteniéndose una corrección no-adiabática. En este caso, la función de onda de la molécula ya no es un producto de funciones.

Al implementarse la aproximación de BO, finalmente se separan los movimientos nucleares en el movimiento del centro de masa de la molécula y los movimientos relativos. Estos últimos son los de interés para el estudio de la estructura molecular. Así, básicamente, para cada estado electrónico se estudia la dinámica nuclear alrededor del mínimo del potencial efectivo, pudiendo asumirse como primera aproximación la separación entre los grados de libertad rotacionales y vibracionales. Los efectos del acople entre ambos movimientos son introducidos a manera de perturbaciones. En el Capítulo II se discute el movimiento nuclear en el marco de la aproximación de BO.

2.3 Bibliografía sugerida

- J.J. Brehm and W.J. Mullin, *Introduction to the Structure of Matter* J.Wiley and Sons (1989).
- P. Atkins and R. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics* 4th Ed., Oxford University Press (2005).
- D.W. Oxtoby, H.P Gillis and A. Campion, *The Principles of Modern Chemistry*, 6-th Ed., Thomson (2008)
- R. Leighton, *Principles of Modern Physics*, McGraw- Hill (1959).
- I.N. Levine, *Molecular Spectroscopy*, Wiley (1975).

Para complementar el Apéndice:

- G. A. Hagedorn and A. Joye, *On the mathematical treatment of the Born-Oppenheimer approximation*, J. Math. Phys. **55**, 053504 (2014)
- T. Jecko *Mathematical Analysis of Born–Oppenheimer Approximations*, arXiv:1303.5833v3[math-ph], (2012)
- H. Essén, *The Physics of the Born-Oppenheimer Approximation*, Int. J. of Quantum Chemistry, **12**, 721 (1977).
- B.T. Sutcliffe and R.G. Woolley, *On the Quantum Theory of Molecules*, J. Chem. Phys. **137**, 22A544 (2012).
- J.C. Tully, *Perspective: Nonadiabatic Dynamics Theory*, J. Chem. Phys. **137**, 22A301 (2012).
- J. Leszczynski Ed., *Handbook of Computational Chemistry*, Springer (2012)

Parte II

Superconductividad

CAPÍTULO 3

SUPERCONDUCTIVIDAD

3.1 Fenomenología

La resistencia ofrecida al paso de la corriente eléctrica en los metales transforma parte de su energía en calor que se disipa al medio ambiente (efecto Joule). Dicha resistencia se debe fundamentalmente a la interacción entre los portadores de carga (electrones) y las vibraciones de la red cristalina en la cual se mueven (fonones), dando lugar a un movimiento "viscoso" de los electrones. Esto queda expresado en la ley de Ohm $\vec{J} = \sigma \vec{E}$ (siendo \vec{J} la densidad de corriente), la cual nos dice básicamente que la velocidad promedio de los electrones es proporcional a la fuerza de arrastre provista por el campo eléctrico \vec{E} . Ahora bien, la intensidad de las vibraciones de red depende de la temperatura T . Así, se espera que la resistencia decrezca al disminuir T , hecho que se observa experimentalmente en todos los metales para un rango de temperaturas bastante amplio, dependiendo este último del material.

Dado que el número medio de fonones tiende a cero al aproximarnos al cero absoluto, esperamos entonces que la resistencia se anule continuamente en dicho límite¹. Intentando estudiar este efecto, en 1911 el físico holandés Heike Kamerlingh Onnes, uno de los pioneros en el desarrollo de técnicas para enfriar materiales a temperaturas cercanas al cero absoluto, llevó a cabo un descubrimiento espectacular. Analizando las propiedades a muy

¹En realidad, en algunos metales como el cobre y la plata la presencia de impurezas y otros defectos hacen que exista una resistencia residual no nula independiente de T cerca del cero absoluto

3.1. FENOMENOLOGÍA

bajas temperaturas de diferentes metales, tales como mercurio, plomo y estaño, encontró que la resistencia eléctrica decae abruptamente a cero para temperaturas por debajo de cierto valor crítico T_c (el cual es característico de cada material), con valores muy por encima del cero absoluto, tal como se muestra en la figura 3.1 (por ejemplo, $T_c \approx 4\text{ K}$ para el mercurio).

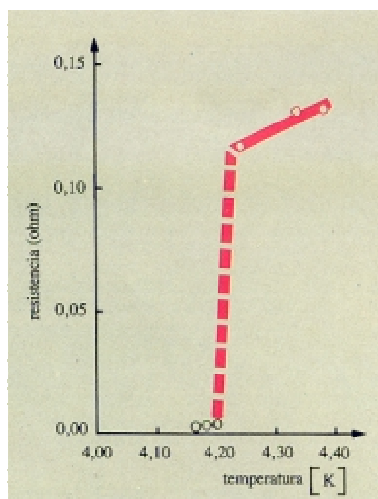


FIGURE 3.1: Resistencia eléctrica del mercurio en función de la temperatura.

La desaparición completa de la resistencia eléctrica se demuestra muy claramente en experimentos de corrientes persistentes en anillos superconductores. Esto es, mediante un pulso de campo magnético se induce una corriente en un anillo de material superconductor ($T < T_c$). Una vez establecida, se ha observado que dicha corriente fluye sin ninguna disminución perceptible por períodos de más de un año. Mas aún, estimaciones del tiempo de decaimiento característico en la corriente, basados en mediciones usando técnicas de resonancia nuclear dan una cota inferior de 10^5 años!

Ahora bien, un superconductor no es simplemente un conductor perfecto, esto es, un material que obedece la ley de Ohm, pero con una resistencia eléctrica despreciable. Esto se evidencia en el llamado **efecto Meissner** (descubierto por W. Meissner y R. Ochsenfeld en 1933): si colocamos un material superconductor

en presencia de un campo magnético externo, el mismo es **expelido** del material. En otras palabras, el campo en el interior del material (o mejor dicho, la inducción magnética \vec{B}) se anula completamente, es decir, un superconductor es un **diamagneto perfecto**. Veamos esto en mas detalle.

Supongamos que tenemos una densidad de corriente finita en el material. En virtud de la ley de Ohm

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}, \quad (3.1)$$

si tomamos el límite $\sigma \rightarrow \infty$, el campo eléctrico debe anularse, ya que de otro modo tendríamos una densidad infinita. Por la ley de Faraday

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (3.2)$$

esto implica que

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0$$

esto es, $\vec{B} = cte$ en el interior de un conductor perfecto. Si tenemos entonces un material a $T < T_c$ y aplicamos el campo externo, el mismo no puede penetrar en el material, ya que la variación del campo genera supercorrientes (esto es, corrientes sin disipación) en el interior del material que cancelan perfectamente el campo externo (ley de Lenz). Por otro lado, si tenemos un material a $T > T_c$ el campo sí puede penetrar en el material. Si a continuación se enfria el material por debajo de T_c en presencia del campo, el mismo permanece, ya que se debe mantener la condición de $\vec{B} = cte$. Es precisamente en esta última situación que un superconductor se diferencia de un conductor perfecto. Si se enfria un superconductor por debajo de T_c en presencia de un campo externo el campo en el interior también se anula. Este es el efecto Meissner.

Esto último tiene una implicancia sumamente importante. Mientras que en el caso de un hipotético conductor perfecto el estado del material depende de su historia previa, el estado de un superconductor es independiente de la misma y esta caracterizado por campo magnético y resistencia eléctrica zero. En otras palabras, la superconductividad constituye un **estado de equilibrio termodinámico**.

Otra propiedad importante de los superconductores es que la corriente eléctrica no puede superar un cierto valor crítico. Superado el mismo la superconductividad se destruye y el material recupera su condición de conductor normal.

3.2 Termodinámica

El estado superconductor es pues una nueva fase termodinámica. En ausencia de campo magnético aplicado, la transición de fase superconductor - metal normal ocurre en la temperatura crítica. Los parámetros termodinámicos intensivos que describen el estado de este tipo de sistemas son la temperatura y el campo magnético aplicado \vec{H} . La variable termodinámica extensiva asociada al campo es la magnetización \vec{M} o, equivalentemente, la inducción magnética $\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) = \mu\vec{H}$.

Si el campo aplicado supera un cierto valor crítico $\vec{H}_c(T)$ la superconductividad desaparece. Esto es debido a que la intensidad de las supercorrientes necesarias para mantener $B = 0$ dentro del material supera el valor de la corriente crítica. En la Fig.3.2 vemos una isoterma típica B vs. H . Para $H < H_c(T)$ el sistema es un diamagneto perfecto $B = 0$; para $H > H_c(T)$ el material se vuelve normal y $B = \mu H$ (en metales normales $\mu \approx \mu_0$, la permeabilidad del vacío). Este salto en la inducción magnética al alcanzar el punto de transición $H = H_c(T)$ nos muestra que la transición de fase es de primer orden. Así, en el punto de transición tendremos coexistencia de ambas fases. En la Fig.3.3 se muestra el diagrama de fases H vs. T , esto es, la línea de coexistencia. Vemos que $H_c \rightarrow 0$ cuando $T \rightarrow T_c$. Así, a campo nulo la transición es de segundo orden o, equivalentemente, el punto ($H = 0, T = T_c$) corresponde al punto crítico de la curva de coexistencia.

El campo crítico $H_c(T)$ tiene mas o menos la misma forma para la mayoría de los metales, la cual puede ser aproximada bastante bien por la ecuación

$$H_c(T) = H_0 \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2} \right) \quad (3.3)$$

A lo largo de la curva de coexistencia la energía libre de Gibbs por unidad de volumen $g(T, H)$ debe ser la misma para ambas fases y por lo tanto cualquier cambio en la energía libre debe serlo también. Tomando en cuenta que

$$dg = -sdT - BdH \quad (3.4)$$

tenemos que

$$-s_n dT - B_n dH = -s_s dT - B_s dH. \quad (3.5)$$

Dado que en la curva de coexistencia $B_s = 0$ y $B_n = \mu_0 H_c(T)$, tenemos que

$$s_n - s_s = -\mu_0 H_c(T) \left(\frac{dH_c(T)}{dT} \right)_{coex}. \quad (3.6)$$

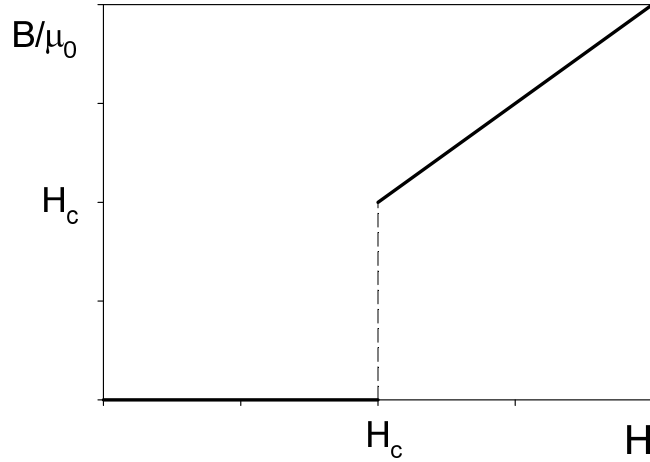


FIGURE 3.2: Inducción magnética vs. campo aplicado a temperatura constante $T < T_c$.

Esta es la ecuación de Clausius-Clapeyron para un material superconductor. Usando la Ec.(3.3) podemos obtener el calor latente de la transición:

$$l = T(s_n - s_s) = \frac{2\mu_0 H_0^2 T^2}{T_c^2} \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2}\right). \quad (3.7)$$

el cual se anula para $T \rightarrow T_c$, como era de esperar en un punto crítico. Notemos también que

$$\left(\frac{dH_c(T)}{dT}\right)_{coex} \rightarrow 0$$

cuando $T \rightarrow 0$, con lo cual $s_n - s_s \rightarrow 0$. Este comportamiento es consistente con el tercer principio de la termodinámica (ley de Nernst). Si integramos la Ec.(3.4) a temperatura constante, desde $H = 0$, obtenemos

$$g(T, H) - g(T, 0) = - \int_0^H B dH'. \quad (3.8)$$

Dado que $g_s(T, H_c) = g_n(T, H_c)$ tenemos

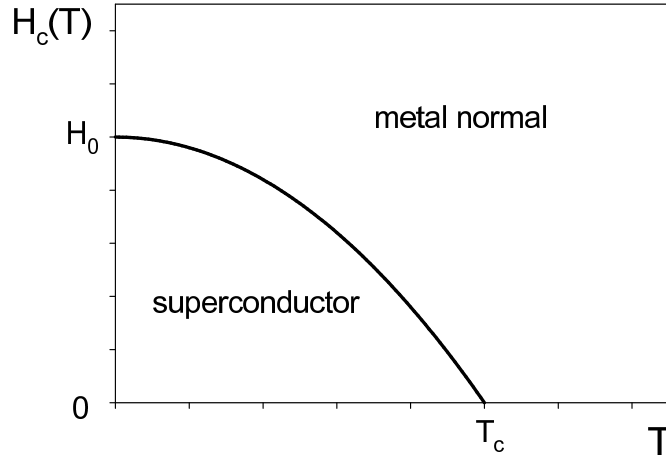


FIGURE 3.3: Diagrama de fases campo aplicado vs. temperatura.

$$g_s(T, 0) - g_n(T, 0) = - \int_0^{H_c} (B_n - B_s) dH' = \mu_0 \int_0^{H_c} M_s(H') dH',$$

donde hemos usado que $B_n = \mu_0 H$ y $B_s = \mu_0 (H + M_s)$. Si $B_s = 0$ en toda la muestra (efecto Meissner) esto implica $M_s = -H$ y por lo tanto

$$g_s(T, 0) - g_n(T, 0) = -\frac{\mu_0}{2} H_c^2 \quad (3.9)$$

Vemos así que la energía libre de la fase superconductor en ausencia de campo aplicado es menor que la del metal normal en una cantidad $-\frac{\mu_0}{2} H_c^2$, equivalente a la energía del campo magnético necesario para destruir la superconductividad a dicha temperatura (por lo cual se la denomina la energía de condensación). Notemos que $g_s(T, 0) = g_n(T, 0)$ en el límite $T \rightarrow T_c$, como debe ser.

Veremos a continuación algunas teorías fenomenológicas que describen el comportamiento de los superconductores.

3.3 Teoría de London

La primera descripción teórica de los aspectos fundamentales del compartamiento de los superconductores (esto es, resistencia cero y diamagnetismo perfecto) fué propuesta en 1935 por los hermanos F. y H. London. La misma puede básicamente resumirse en la siguiente ecuación de estado electrodinámica: $\vec{J} \propto -\vec{A}$ (que reemplaza a la ley de Ohm) donde \vec{A} es el potencial vector asociado al campo magnético en el material. Si bien la justificación rigurosa de esta relación es cuántica (de hecho, la superconductividad es un fenómeno microscópico estrictamente cuántico), podemos obtener una idea bastante clara de su origen a través de argumentos clásicos.

Consideremos el modelo clásico de Drude de un gas de electrones libres para la conductividad eléctrica:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = e\vec{E} - m\vec{v}/\tau. \quad (3.10)$$

Aquí \vec{v} es la velocidad media de los electrones. Tanto la velocidad media como el campo eléctrico son el promedio en una región de orden l_e , siendo este último el camino libre medio de los electrones para colisiones con los defectos del metal. τ es un tiempo de relajación fenomenológico, que básicamente describe el tiempo que, en ausencia de campo, tomará para que \vec{v} decaiga a cero, debido a las colisiones con los defectos. En un metal normal, la competencia entre ambos términos en la Ec.(3.10) lleva a un estado estacionario en el cual $\vec{v} = e\vec{E}\tau/m$. Si hay n portadores de carga por unidad de volumen, esto produce una densidad de corriente eléctrica $\vec{J} = ne\vec{v} = (ne^2\tau/m)\vec{E}$, esto es, la ley de Ohm.

Asumiremos ahora que hay una densidad n_s de "electrones superconductores", esto es, electrones que se mueven sin fricción (tomando $\tau_s \rightarrow \infty$). La ley de Ohm es reemplazada entonces por una supercorriente acelerada. Esto es, tenemos $d\vec{v}_s/dt = e\vec{E}/m$ y $\vec{J}_s = n_s e \vec{v}_s$, de tal manera que la supercorriente esta dada por

$$\frac{\partial \vec{J}_s}{\partial t} = (n_s e^2/m) \vec{E}$$

Tomando el rotor de la ecuación anterior y usando la ley de Faraday (3.2) tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m}{n_s e^2} \nabla \times \vec{J}_s + \vec{B} \right) = 0$$

es decir

3.3. TEORÍA DE LONDON

$$\frac{m}{n_s e^2} \nabla \times \vec{J}_s + \vec{B} = \text{constante}$$

Imponiendo ahora que el tanto el campo magnético como las corrientes se anulen en el interior del material, esto implica que la constante es cero, esto es

$$\nabla \times \vec{J}_s = -\frac{n_s e^2}{m} \vec{B} \quad (3.11)$$

Esta se conoce como **ecuación de London**. Utilizando la definición del potencial vector $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ obtenemos

$$\nabla \times \left(\vec{J}_s + \frac{n_s e^2}{m} \vec{A} \right) = 0$$

que implica

$$\vec{J}_s + \frac{n_s e^2}{m} \vec{A} = \nabla \chi$$

La corriente debe satisfacer la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot \vec{J}_s + \frac{\partial \rho_s}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla \cdot \vec{J}_s = 0,$$

ya que no hay acumulaciones de carga en las situaciones que vamos a estudiar. Sobre la superficie del material esta condición implica que la componente normal de \vec{J}_s es continua y por lo tanto $\vec{J}_s \cdot \vec{n} = 0$, donde \vec{n} es un vector normal a la superficie. Así, eligiendo el gauge $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ y $\vec{A} \cdot \vec{n} = 0$ (esto se conoce como gauge de London) tenemos que $\nabla^2 \chi = 0$ y $\nabla \chi \cdot \vec{n} = 0$. Para un dominio simplemente conexo la solución de esta ecuación es $\chi = cte$ y por lo tanto

$$\vec{J}_s = -\frac{n_s e^2}{m} \vec{A} \quad (3.12)$$

Consideremos ahora las ecuaciones de Mawell:

$$\mu_0 \vec{J} = \nabla \times \vec{B} \quad (\text{Ampere})$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$

Utilizando la identidad

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{F}) = \nabla(\nabla \cdot \vec{F}) - \nabla^2 \vec{F}$$

podemos reescribir la ley de Ampere como

$$\mu_0 \nabla \times \vec{J} = -\nabla^2 \vec{B}$$

Reemplazando esta última en la ecuación (3.11) tenemos que

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{\lambda^2} \vec{B} \quad (3.13)$$

con

$$\lambda = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 n_s e^2}}.$$

Tomemos un ejemplo simple, como se muestra en la Fig.3.4: un superconductor semi-infinito que se extiende para $z > 0$, con una interfaz plana en $z = 0$ paralela al plano (x, y) ; para $z < 0$ tenemos vacío y un campo externo uniforme $\vec{H} = H_0 \vec{e}_y$, paralelo a la interfaz. Por simetría, el campo en el superconductor será paralelo al campo en el exterior y dependerá solo de z . Así, la ecuación (3.13) toma la forma

$$\frac{d^2 B}{dz^2} = B/\lambda^2.$$

Con las condiciones de contorno $B = \mu_0 H_0$ para $z = 0$ y $B = 0$ para $z \rightarrow \infty$ la solución es

$$B = \mu_0 H_0 e^{-z/\lambda}.$$

La teoría de London predice un **apantallamiento** del campo magnético en el superconductor. Esto es, el campo penetra una distancia λ y decae exponencialmente en el interior. λ se conoce como **longitud de penetración**. De la Ec.(3.11) obtenemos que las supercorrientes también se encuentran localizadas en la superficie en una distancia $\sim \lambda$. Este comportamiento se verifica experimentalmente, si bien los valores de λ medidos difieren de los predichos por la teoría. El apantallamiento es un comportamiento general para diferentes geometrías. En el límite $T \rightarrow T_c^-$, se espera que $n_s \rightarrow 0$ y por lo tanto $\lambda \rightarrow \infty$. Empíricamente se verifica que

$$\lambda(T) \approx \lambda(0) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 \right]^{-1/2}$$

La derivación de la ecuación de London mediante el modelo clásico tiene como principal objeción que la respuesta de un gas de electrones a un campo eléctrico es no local. Esto es, la corriente en un punto está determinada por el campo eléctrico promediado sobre una región $\sim l_e$ alrededor del punto (Drude).

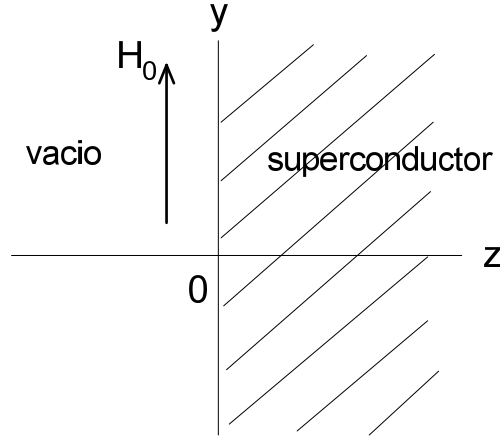


FIGURE 3.4: Superconductor semi-infinito en presencia de un campo externo.

En la derivación anterior, hemos asumido que la conductividad se vuelve infinita en el límite $l_e \rightarrow \infty$. Eso solo es cierto si el campo llena todo el espacio. En el caso en que tenemos interfaces con regiones no superconductoras (el caso de interés), eso no necesariamente es cierto y la conductividad podría resultar finita. No obstante, la ecuación de London es cualitativamente correcta. El siguiente argumento cuántico debido a F. London permite rederivar esta ecuación. Un teorema de la mecánica cuántica que nos dice que, en ausencia de campo eléctrico aplicado, en el estado fundamental del gas de electrones $\langle \vec{p} \rangle = 0$, donde \vec{p} es el momento de los electrones. En presencia de campo magnético, tenemos que el momento canónico es $\vec{p} = m\vec{v} + e\vec{A}$. Así, tenemos que

$$\langle \vec{v}_s \rangle = -\frac{e\vec{A}}{m}$$

en tanto asumamos que la función de onda de los electrones superconductores es “rígida” y retiene su propiedad $\langle \vec{p} \rangle = 0$ a temperatura finita. En otras palabras, se asume que a temperatura finita el estado microscópico del sistema esta descrito por una única función de onda macroscópica (veremos mas adelante que esto es básicamente correcto). La ecuación anterior nos lleva directamente a la Ec.(3.12).

3.4 Teoría de Landau-Ginzburg (LG)

Esta teoría, propuesta por L. Landau y V. Ginzburg en 1950, es una generalización de la teoría de London, que permite considerar materiales inhomogéneos espacialmente, esto es, con regiones superconductoras y regiones normales, además de introducir explícitamente la temperatura. La misma se encuadra en el espíritu de la teoría general de Landau para transiciones de fase de segundo orden, focalizándose por lo tanto en el comportamiento en las cercanías del punto crítico.

Comenzamos asumiendo que el estado superconductor corresponde a un estado cuántico ocupado macroscópicamente (en forma semejante a lo que ocurre en la condensación de Bose-Einstein), que puede por lo tanto ser descrito por una “función de onda macroscópica”² Ψ . En la teoría se propone esta función de onda (en principio una función compleja) como parámetro de orden de la transición. $|\Psi|^2$ se interpreta como la densidad de portadores de carga superconductores $|\Psi|^2 = n_s$. Para mayor generalidad, vamos a suponer que estos portadores de carga tienen una carga efectiva e^* y una masa efectiva m^* (mas adelante veremos que de hecho los portadores de carga son pares de electrones).

La teoría se desarrolla en la forma habitual de la teoría de Landau, proponiendo una funcional energía libre fenomenológica, en el sentido de que depende del parámetro de orden como parámetro variacional. Los valores de equilibrio, tanto del parámetro de orden como de la energía libre se encuentran minimizando esta última respecto del primero. La funcional de LG se asume que es una función analítica del parámetro de orden y por lo tanto admite un desarrollo en potencias del mismo en las inmediaciones del punto crítico. La elección de los primeros términos del desarrollo a conservar se hace en base a consideraciones de simetría. En ausencia de campo externo, se asume que el parámetro de orden (esto es, el valor que minimiza la energía libre) es homogéneo en el espacio (asumiendo una muestra infinita). En este caso la energía libre de LG por unidad de volumen toma la forma

$$f[T, \Psi] = f_n(T) + a_2(T)|\Psi|^2 + a_4(T)|\Psi|^4 \quad (3.14)$$

donde $|\Psi|^2 = \Psi \Psi^*$. $f_n(T)$ es la energía libre por unidad de volumen de la fase normal, de manera que para $|\Psi| = 0$ tenemos $f = f_n$. La elección de los términos en el desarrollo se debe a lo siguiente: a) la energía libre no puede depender directamente de Ψ , ya que tiene que ser real y b) las potencias impares de $|\Psi|$

²Esta es una pseudo-función de onda, en el sentido de que no es una solución de la ecuación de Schrödinger, sino una función de estado macroscópica, que respeta un conjunto de propiedades exigidas a la función de onda.

3.4. TEORÍA DE LANDAU-GINZBURG (LG)

se descartan ya que tornan la energía libre no analítica en $\Psi = 0$. a_4 se asume positivo; de otro modo, deberíamos incluir potencias superiores de $|\Psi|^2$ ya que en caso contrario la energía libre no estará acotada por debajo.

En estas condiciones, podemos minimizar f respecto de $|\Psi|$. Si $a_2 > 0$, tendremos un único mínimo en $|\Psi| = 0$, que corresponde a la fase normal (ver Fig.3.5). Si $a_2 < 0$ tendremos un mínimo absoluto en

$$\Psi_\infty = \sqrt{\frac{|a_2|}{2a_4}} \quad (3.15)$$

que corresponde a la fase superconductor. En este caso, la fase de la función de onda es irrelevante y podemos asumir el parámetro de orden real. La notación Ψ_∞ indica que esta es la solución para una muestra infinita o en una región suficientemente alejada de cualquier borde. Así, la condición $a_2 = 0$ corresponde al punto crítico. Los coeficientes a_2 y a_4 se asumen funciones analíticas de la temperatura. En las inmediaciones del punto crítico, podemos asumir entonces $a_2(T) = \alpha(T - T_c)$ con $\alpha > 0$. El coeficiente $a_4(T)$ se asume en general una función suave de variación lenta con T , con lo cual en el intervalo de temperaturas de interés puede considerarse aproximadamente constante $a_4 = a_4(T_c)$. Evaluando la Ec.(3.14) en este mínimo obtenemos:

$$f_s(T) = f_n(T) - \frac{a_2^2}{4a_4} \quad (3.16)$$

Hasta acá hemos utilizado la notación f para la energía libre, ya que con ella construiremos en seguida la energía libre de Helmholtz $f = f(T, \vec{B})$. No obstante, a campo nulo la misma es idéntica a la energía libre de Gibbs, ya que ambas se encuentran relacionadas por la transformada de Legendre:

$$g(T, \vec{H}) = f(T, \vec{B}) - \vec{B} \cdot \vec{H} \quad (3.17)$$

Así, comparando las ecuaciones (3.9) y (3.16) obtenemos la relación entre el campo crítico y los parámetros de LG:

$$\frac{a_2^2}{4a_4} = \frac{\mu_0}{2} H_c^2(T) \quad (3.18)$$

de donde obtenemos la predicción $H_c(T) \sim (T_c - T)$ en las cercanías del punto crítico, la cual es consistente con el resultado experimental (3.3).

Consideremos ahora que tenemos un campo externo aplicado \vec{H} y permitamos la posibilidad de tener un parámetro de orden que varía espacialmente $\Psi(\vec{r})$. En otras palabras, asumimos que pueden existir regiones

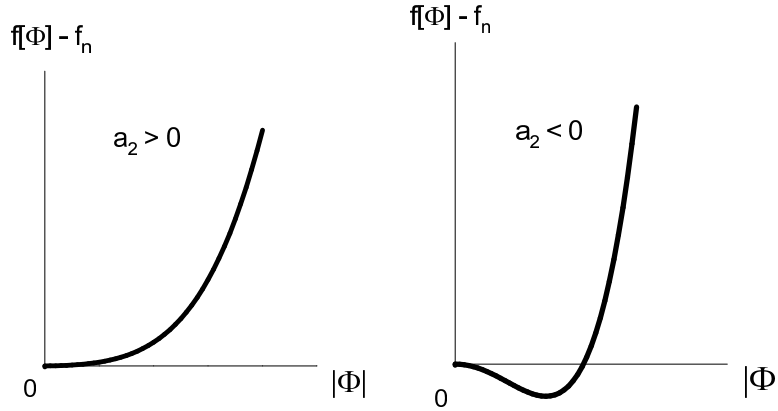


FIGURE 3.5: Funcional de Landau–Ginzburg para $T > T_c$ ($a_2 > 0$) y $T < T_c$ ($a_2 < 0$) en ausencia de campo externo.

de la muestra superconductoras y regiones normales. Así, podemos tener un campo en la muestra que varía espacialmente $\vec{B}(\vec{r})$, el cual tendrá asociado un potencial vector local $\vec{A}(\vec{r}) = \nabla \times \vec{B}(\vec{r})$. Dado que los gradientes en la función de onda $\Psi(\vec{r})$ se asocian al momento de las partículas, debemos incluir un término asociado a la energía cinética. La densidad de energía libre de Helmholtz local puede expresarse entonces como

$$f[T, \Psi(\vec{r}), \vec{B}(\vec{r})] = f_n(T) + a_2(T)|\Psi|^2 + a_4(T)|\Psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| (-i\hbar\nabla - e^*\vec{A})\Psi \right|^2 + \frac{B^2}{2\mu_0} \quad (3.19)$$

El término

$$\frac{1}{2m^*} \left| (-i\hbar\nabla - e^*\vec{A})\Psi \right|^2$$

corresponde a la energía cinética de una partícula cargada en presencia campo, mientras que el último término es la energía del campo en el interior. A partir de la Ec.(3.17) podemos obtener la densidad de energía libre de Gibbs

3.4. TEORÍA DE LANDAU-GINZBURG (LG)

$g[T, H, \Psi(\vec{r}), \vec{B}(\vec{r})]$, la cual integrada en el volumen de la muestra nos da la funcional energía libre total

$$G[T, \vec{H}, \Psi(\vec{r}), \vec{B}(\vec{r})] = \int dr^3 [f_n(T) + a_2(T)|\Psi|^2 + a_4(T)|\Psi|^4 + \frac{1}{2m^*} |(-i\hbar\nabla - e^*\vec{A})\Psi|^2 + \frac{B^2}{2\mu_0} - \vec{B} \cdot \vec{H}] \quad (3.20)$$

Esta expresión debe interpretarse como sigue. Tanto $\Psi = \Psi(T, \vec{H}, \vec{r})$ como $\vec{B} = \vec{B}(T, \vec{H}, \vec{r})$ son ecuaciones de estado (locales). En la teoría se asumen como parámetros variacionales. Una vez evaluada G en su mínimo, esto nos da la auténtica energía libre de Gibbs $G = G(T, \vec{H})$; la expresión (3.20), debe considerarse como una funcional de $\Psi(\vec{r})$ y $\vec{B}(\vec{r})$. Para minimizar $G[T, \vec{H}, \Psi(\vec{r}), \vec{B}(\vec{r})]$ respecto de $\Psi(\vec{r})$ debemos considerar variaciones $\delta\Psi(\vec{r})$ tal que $|\delta\Psi(\vec{r})/\Psi(\vec{r})| \ll 1$ en toda la muestra y tomar en cuenta que $\Psi(\vec{r})$ es una función compleja. De esta manera, deberíamos considerar variaciones independientes en sus partes real e imaginaria. En lugar de esto, podemos considerar variaciones de $\delta\Psi(\vec{r})$ y $\delta\Psi^*(\vec{r})$ como si fueran independientes. Así, integrando por partes y asumiendo la condición de contorno de que la componente normal de la velocidad de las partículas $(-i\hbar\nabla - e^*\vec{A})\Psi$ se anula en el borde de la muestra, llegamos a

$$a_2(T)\Psi + 2a_4(T)\Psi|\Psi|^2 + \frac{1}{2m^*}(-i\hbar\nabla - e^*\vec{A})^2\Psi = 0 \quad (3.21)$$

Si ahora minimizamos G respecto de variaciones en $\vec{A}(\vec{r})$ obtenemos

$$\vec{J}_s = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \vec{B} = \frac{e^*\hbar}{2m^*i} (\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) - \frac{e^{*2}}{m^*} \vec{A}|\Psi|^2 \quad (3.22)$$

Para obtener la ecuación anterior hemos utilizado las identidades vectoriales

$$\int \vec{C} \cdot (\nabla \times \vec{D}) dV = \int \vec{D} \cdot (\nabla \times \vec{C}) dV + \oint (\vec{D} \times \vec{C}) \cdot d\vec{S}$$

y

$$\oint (\vec{E} \times \vec{F}) \cdot d\vec{S} = \oint \vec{E} \cdot (\vec{F} \times d\vec{S})$$

donde $\int dV$ es una integral sobre el volumen de la muestra y $\oint d\vec{S}$ es una integral sobre la superficie que encierra el volumen. Además, hemos utilizado la condición de contorno $(\vec{B} - \mu_0\vec{H}) \times \vec{n} = 0$, donde \vec{n} es un vector unitario normal

a la superficie. Esto es, la componente tangencial de la inducción magnética es la misma que la del metal normal en la superficie.

Recordando la interpretación de $|\Psi|^2 = n_s$, podemos reconocer en el último término de la ecuación (3.22) la ecuación de London. Así, la teoría de LG nos brinda una generalización de la de London para el caso en que el parámetro de orden (número de portadores de carga superconductores) varía espacialmente.

Las soluciones de las ecuaciones diferenciales (3.21) y (3.22) nos dan el parámetro de orden y el campo magnético en el interior de la muestra. En general, son complicadas de resolver analíticamente, pero podemos tener una idea general del comportamiento predicho por las mismas en ciertos casos límites.

Tomemos primero el caso de un superconductor semi-infinito con una superficie plana (como el mostrado en la figura 3.4) en ausencia de campo $\vec{B} = \vec{A} = 0$. En este caso podemos asumir que el parámetro de orden es una función real (con lo cual se satisface la Ec.(3.22)), la cual por simetría depende solo de la coordenada z , $\Psi = \Psi(z)$. Introduciendo la función adimensional

$$\phi(z) = \Psi(z) \sqrt{\frac{2a_4}{|a_2|}} = \frac{\Psi(z)}{\Psi_\infty} \quad (3.23)$$

la Ec.(3.21) toma la forma

$$-\xi^2 \frac{d^2\phi}{dz^2} - \phi + \phi^3 = 0 \quad (3.24)$$

donde

$$\xi(T) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^*|a_2(T)|}} \quad (3.25)$$

tiene unidades de longitud y se conoce como **longitud de coherencia**. Para entender el significado de esta longitud, analicemos el comportamiento de ϕ en la interface entre el la región interior del superconductor ($\phi = 1$) y el exterior, donde ϕ decae a cero. En la región donde ϕ comienza a decaer podemos asumir $\phi(z) = 1 + g(z)$, con $g(z) \ll 1$ y linealizar la Ec.(3.24). Así, a primer orden en g obtenemos

$$\xi^2 g'' + (1 + g) - (1 + 3g + \dots) = 0$$

o

$$g'' = \frac{2}{\xi^2} g$$

3.4. TEORÍA DE LANDAU-GINZBURG (LG)

de donde

$$g(z) \sim e^{-\sqrt{2}z/\xi(T)}$$

Vemos así que ξ nos da la distancia característica en la cual el parámetro de orden decae desde su valor de saturación en el interior de la muestra a cero en el contorno. Notemos que ξ diverge para $T \rightarrow T_c^-$.

Resolver las ecuaciones de LG en el caso con campo requiere de métodos numéricos. No obstante, podemos tener una idea aproximada del comportamiento esperado, si despreciamos las variaciones del parámetro de orden cerca de la interfaz (en general es una mala aproximación pero basta para el argumento presente). En dicho caso, la Ec.(3.22) se reduce a la de London (un decaimiento exponencial) con una longitud de penetración está dada por

$$\lambda = \sqrt{\frac{2m^*a_4}{|a_2|e^{*2}}}$$

Tenemos así que la interfaz entre el estado normal y el superconductor está caracterizada por dos longitudes características relacionadas: la longitud de penetración (que nos da la distancia característica en la cual el campo magnético decae a cero) y la de coherencia (que nos da la distancia característica en la cual el la densidad de portadores decae a cero).

Hasta ahora no se ha hecho evidente ninguna consecuencia directa de tener un parámetro de orden complejo $\Psi = |\Psi| e^{i\varphi}$. La Ec.(3.22) puede ser reescrita como

$$\vec{J}_s = \frac{e^*\hbar}{m^*} |\Psi|^2 \nabla \varphi - \frac{e^{*2}}{m^*} \vec{A} |\Psi|^2 \quad (3.26)$$

de donde

$$\frac{m^*}{e^{*2}} \frac{\vec{J}_s}{|\Psi|^2} + \vec{A} = \frac{\hbar}{e^*} \nabla \varphi \quad (3.27)$$

Consideremos ahora un superconductor que no sea simplemente conexo, por ejemplo, un anillo en presencia de un campo magnético externo. Calculemos el flujo magnético a través del hueco:

$$\Phi = \int \vec{B} \cdot d\vec{S} = \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}$$

donde $\oint d\vec{l}$ es una integral de línea en un contorno dentro del superconductor que rodea al área del hueco, tal que encierra todo el flujo magnético. Dado que $d\varphi =$

$\nabla\varphi \cdot d\vec{l}$ y dado que el parámetro de orden tiene que ser una función univaluada de \vec{r} , tenemos que

$$\oint \nabla\varphi \cdot d\vec{l} = 2\pi n$$

con $n = 0, 1, 2, \dots$. Así, integrando la Ec.(3.27) tenemos

$$\Phi' \equiv \frac{m^*}{e^{*2}} \oint \frac{\vec{J}_s \cdot d\vec{l}}{|\Psi|^2} + \Phi = \frac{h}{e^*} n. \quad (3.28)$$

La cantidad Φ' se conoce como *fluxoide*. La ecuación anterior nos dice que Φ' se encuentra cuantizada, es decir, es siempre un múltiplo entero de $\Phi_0 = h/e^*$. Si las dimensiones del anillo son mucho mayores que la longitud de penetración, de manera que el camino de integración puede tomarse en regiones en las cuales $\vec{J}_s = 0$, tenemos que $\Phi = \Phi'$ y es el propio flujo magnético el que se encuentra cuantizado³.

3.5 Descripción microscópica

La cuantización del flujo ha sido verificada experimentalmente y el valor de Φ_0 medido, mostrando claramente que $e^* = 2e$. Basándose en esta evidencia L. N. Cooper propone en 1956 que los portadores de carga responsables de la superconductividad no son electrones, sino pares de electrones (llamados desde entonces pares de Cooper). La formación de los pares de Cooper se debe a una interacción efectiva *atractiva* entre electrones con energías cercanas al nivel de Fermi. Esta interacción (llamada de apareamiento) está mediada por fonones. Puede pensarse que un electrón atrae a los iones positivos cercanos de la red. Estos iones al ser mucho mas pesados que los electrones, tienen una inercia mucho mayor. Por esta razón, cuando un electrón pasa cerca de un conjunto de iones positivos, estos iones no vuelven inmediatamente a su posición de equilibrio original. Ello resulta en un exceso de cargas positivas en el lugar por el que el electrón ha pasado. Un segundo electrón en las cercanías va a sentir pues una fuerza atractiva resultado de este exceso de cargas positivas. Esta especie de “energía de ligadura” entre los dos electrones se denomina gap superconductor, y se denota Δ . En un conductor en estado normal (es decir, cuando no es superconductor), es posible excitar un electrón añadiéndole cualquier energía que queramos. Simplemente aumentaremos su energía cinética

³La cuantización del flujo puede derivarse de la teoría de London en dominios no simplemente conexos utilizando argumentos cuánticos.

3.5. DESCRIPCIÓN MICROSCÓPICA

en igual proporción. Sin embargo, en el caso de un par de Cooper es distinto: si le aplicamos una energía inferior a 2Δ (el doble, debido a que el gap se toma como energía por electrón), no lograremos excitarlo dado que no romperemos el par. Si la energía es superior a 2Δ , entonces el par se rompe y la energía que le sobra se convierte en energía cinética de los electrones. La existencia de este gap en la banda electrónica fue verificada experimentalmente en 1954, mediante mediciones de calor específico. Mas aún, se observó que la razón $2\Delta/k_B T_c \approx 3.5$, independientemente del material.

Los pares de Cooper tienen spin entero (su estado fundamental es un singlete) y por lo tanto se comportan como bosones. De esta manera, la transición al estado superconductor puede pensarse como una condensación de Bose–Einstein. Un aspecto importante, es que los pares de Cooper no son entidades localizadas espacialmente. Estimaciones del tamaño de los pares (esto es, de la distancia entre los electrones del par) muestran que esta es mucho mayor que la distancia promedio entre electrones en el metal. De esta manera, existe una alta superposición entre diferentes pares y por lo tanto el sistema no admite una descripción en términos de bosones independientes, sino que debe considerarse el problema de muchos cuerpos.

En 1957 J. Bardeen, L. N. Cooper y L. Schrieffer formulan una teoría (llamada teoría BCS en honor a sus autores), en la cual proponen una función de onda de muchos cuerpos, en la cual los pares de Cooper constituyen excitaciones al mar de Fermi. Mediante un tratamiento variacional de dicha función de onda y asumiendo una interacción atractiva entre electrones con energías cercanas al nivel de Fermi, pudieron derivar la mecánica estadística de estos sistemas, reproduciendo la mayoría de las observaciones experimentales (gap en el espectro de energía y su relación con T_c , efecto Meissner, etc.). En 1958, N. Bogoliubov obtuvo una reafirmación de la teoría mostrando que la función de onda BCS puede ser obtenida mediante una transformación canónica del Hamiltoniano electrónico. En 1959, L. Gorkov mostró que la teoría de Landau–Ginzburg puede ser derivada rigurosamente como un caso particular de la BCS para temperaturas cercanas a la crítica.

La teoría BCS (cuya complejidad excede el nivel del presente curso) es una de las más elegantes de la Materia Condensada y explica prácticamente toda la fenomenología de la superconductividad clásica (la llamada superconductividad de baja temperatura). Bardeen, Cooper y Schrieffer recibieron el premio Nobel de física en 1972 por esta contribución.

3.6 Superconductores tipo I y II

Una de las predicciones mas interesantes de la teoría de LG es la existencia de dos tipos de materiales superconductores. Consideremos nuevamente el caso de una interfaz plana entre un superconductor semi-infinito y una región normal (figura 3.4). En la región de la interfaz tenemos un estado mixto donde conviven ambos estados, ya que la densidad de portadores superconductores es menor que en el interior del superconductor y a su vez el campo magnético penetra una cierta distancia. Esta región se denomina una pared de dominio, en analogía con las paredes entre dominios magnéticos en un ferromagneto y está caracterizada por las longitudes ξ y λ , tal como se muestra en la figura 3.6. La existencia de esta pared implica una energía libre superficial, que sería la diferencia de energía libre entre el estado con la pared y un estado con ausencia de pared (un salto abrupto del estado normal al superconductor). Notemos que tanto la longitud de penetración como la de coherencia divergen como $(T_c - T)^{1/2}$ para $T \rightarrow T_c^-$. Esto nos permite definir el llamado parámetro adimensional de LG

$$\kappa = \frac{\lambda(T)}{\xi(T)} \quad (3.29)$$

el cual es aproximadamente independiente de la temperatura⁴. Esto nos permite analizar dos límites diferentes: a) $\kappa \ll 1$. En este caso el campo penetra poco y tenemos una región relativamente extensa donde $\Psi < \Psi_\infty$. Estos materiales se conocen como **superconductores tipo I**. b) $\kappa \gg 1$. En este caso tenemos una mayor penetración del campo y una transición mas abrupta entre las regiones normal y superconductor. Estos materiales se conocen como **superconductores tipo II**. La energía libre superficial en todos los casos esta determinada por la competencia entre dos efectos. Por un lado, un valor grande de ξ tiende a aumentar la energía libre, ya que el estado superconductor tiene menor energía libre que el normal (ver Ec.(3.9)). Por otro lado, una mayor penetración del campo también aumenta la energía. La región donde estos efectos compiten tiene una extensión aproximada $\xi - \lambda$. Supongamos que el campo externo es cercano al crítico $H_0 \approx H_c$. Podemos entonces estimar la energía libre superficial por unidad de area de la interfaz a partir de la Ec.(3.9) como

$$\gamma \sim \frac{\mu_0}{2} H_c^2 \delta \quad (3.30)$$

donde $\delta = \xi - \lambda$. En el caso de superconductores tipo II tenemos que la longitud relativa $\delta < 0$. Esto implica una energía libre superficial *negativa*, lo cual favorece

⁴Al menos para temperaturas cercanas a la crítica; recordemos siempre que esta es la región de validez de la teoría

3.6. SUPERCONDUCTORES TIPO I Y II

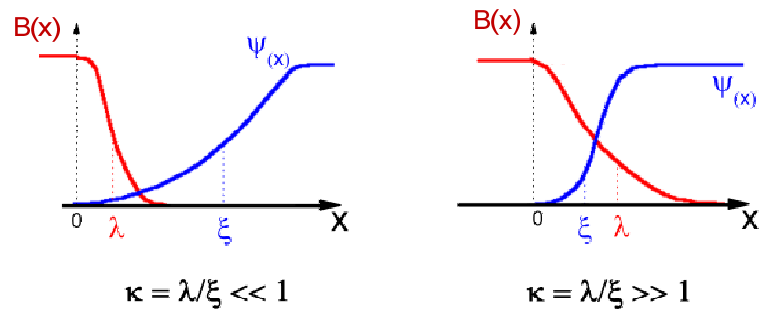


FIGURE 3.6: Comportamiento típico del campo externo y parámetro de orden para superconductores tipo I y II.

la formación de interfaces. En una muestra finita, esto sugiere una tendencia a fragmentar el sistema en muchos dominios superconductores separados por regiones normales, de manera de aumentar el número de interfaces. Esto implicaría una penetración parcial del campo magnético y la consiguiente desaparición del efecto Meissner en términos globales. Por el contrario, en el caso de superconductores tipo I, la energía superficial es positiva, lo cual tiende a estabilizar la formación de grandes dominios superconductores.

El argumento anterior puede formalizarse a partir de las ecuaciones de LG como sigue. Podemos escribir la energía libre superficial como

$$\gamma = \int_0^\infty dz (g(T, H, \Psi, B) - g(T, H, \Psi_\infty, 0))$$

De la Ec.(3.20) y evaluando en $H = H_c$ tenemos

$$\gamma = \int_0^\infty dz \left[a_2(T)|\Psi|^2 + a_4(T)|\Psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| (-i\hbar\nabla - e^*\vec{A})\Psi \right|^2 + \frac{1}{2\mu_0} (B - \mu_0 H_c)^2 \right] \quad (3.31)$$

donde hemos usado las Ecs.(3.15) y (3.18). Si multiplicamos la Ec.(3.21) por Ψ^* e integramos por partes obtenemos la identidad

$$\int_0^\infty dz \left[a_2(T)|\Psi|^2 + 2a_4(T)|\Psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| (-i\hbar\nabla - e^*\vec{A})\Psi \right|^2 \right] = 0$$

la cual reemplazada en la Ec.(3.31) nos da

$$\gamma = \int_0^\infty dz \left[-a_4(T)|\Psi|^4 + \frac{1}{2\mu_0} (B - \mu_0 H_c)^2 \right] \quad (3.32)$$

Comparando con la Ec.(3.30) y usando las Ecs.(3.15) y (3.18) obtenemos

$$\delta = \int_0^\infty dz \left[\left(1 - \frac{B}{\mu_0 H_c} \right)^2 - \left(\frac{|\Psi|}{\Psi_\infty} \right)^4 \right] \quad (3.33)$$

Esta expresión muestra claramente la competencia entre la energía magnética y la condensación superconductor, fundamentando la suposición $\delta = \xi - \lambda$. Para evaluar esta expresión es necesario conocer $\Psi(z)$ y $B(z)$, es decir, las soluciones de las ecuaciones de LG. Soluciones numéricas de dichas ecuaciones confirman que $\delta > 0$ para $\kappa \ll 1$ y $\delta < 0$ para $\kappa \gg 1$.

En los metales puros que exhiben propiedades superconductoras en general $\lambda \approx 500 \text{ \AA}$ y $\xi \approx 3000 \text{ \AA}$, de manera que $\kappa \ll 1$, es decir, son superconductores tipo I. Si bien muy interesantes desde el punto de vista teórico, son de escaso

3.6. SUPERCONDUCTORES TIPO I Y II

interés práctico, ya que presentan temperaturas y campos críticos muy bajos (las temperaturas críticas son menores a los 10 K), con lo cual no pueden soportar corrientes elevadas. Los superconductores tipo II son aleaciones y en general presentan temperaturas y campos críticos bastante elevados. En particular, los mayores campos críticos son alcanzados en general en aleaciones de niobio (ej., Nb_3Ti , Nb_3Sn , etc.), los cuales tienen temperaturas críticas entre 10 y 25 K y presentan campos críticos de hasta 40 T (para $T \ll T_c$).

Un análisis detallado de la teoría (confirmado experimentalmente) muestra que los superconductores tipo II presentan dos campos críticos H_{c1} y H_{c2} , los cuales dependen de la temperatura. Para $H < H_{c1}$ tenemos efecto Meissner pleno, es decir, el campo magnético no puede penetrar en la muestra. Para $H > H_{c1}$ el campo magnético penetra paulatinamente hasta que en $H = H_{c2}$ el campo penetra totalmente y el material se vuelve normal (esto es, se cumple que $B \propto H$). El estado con penetración parcial del campo se conoce como *estado mixto*, ya que en el mismo coexisten regiones superconductoras y normales. Es precisamente la presencia del estado mixto lo que permite alcanzar altos campos críticos y por lo tanto soportar altas corrientes eléctricas. La transición termodinámica ocurre en $H = H_{c1}$. El diagrama de fases para superconductores tipo II se muestra en la figura 3.7, el cual debe ser comparado con el de la figura 3.3, que corresponde a los superconductores tipo I.

La penetración del campo magnético no sucede de forma arbitraria, sino bajo la forma de un arreglo regular de tubos de flujo, como se muestra esquemáticamente en la figura 3.8. Dentro de cada celda del arreglo se encuentra un vórtice de supercorriente, que concentra el flujo hacia el centro del tubo. Cada tubo contiene un quantum de flujo Φ_0 . El núcleo del vórtice es un tubo de radio ξ , dentro del cual el material se encuentra en la fase normal. Los vórtices de hecho interactan entre ellos, ya que las corrientes que circulan en ellos interfieren y se puede ver que dicha interacción es repulsiva. Esto hace que, como los átomos en un cristal, los vórtices alcancen un estado de equilibrio en el cual (vistos desde la dirección del campo magnético) forman una red triangular. Este estado se conoce como red de Abrikosov, en honor a Alexei A. Abrikosov quien predijo teóricamente su existencia en 1957. A medida que el campo externo aumenta por encima de H_{c1} el número de vórtices que penetran el material aumenta, la red de Abrikosov se contrae, pero el flujo dentro de cada vórtice es siempre el mismo, hasta que el campo alcanza H_{c2} y todo el material se vuelve normal.

Los vórtices no solo interactan entre ellos, sino que también interactan con otras corrientes que circulan por el superconductor. Supongamos que se hace circular por el material una corriente de densidad \vec{J} perpendicular a la dirección de las líneas de flujo asociadas a los vórtices. La interacción de los vórtices con

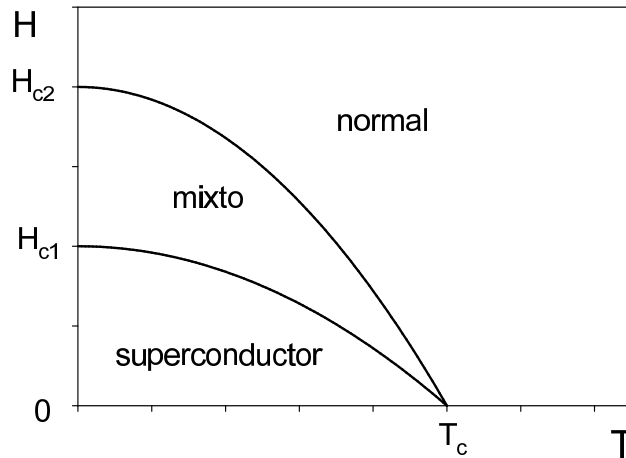


FIGURE 3.7: Diagrama de fases campo aplicado vs. temperatura para superconductores tipo II.

la misma hace que se muevan y ese movimiento involucra fricción. El resultado entonces de dicho movimiento es la aparición de una resistencia eléctrica efectiva, con lo cual el material se comporta como un conductor normal. Esto puede verse a partir del siguiente argumento. Desde la teoría puede verse que la presencia de una corriente \vec{J} genera en un vórtice aislado una fuerza "tipo Lorentz" $\vec{F} \propto \vec{J} \times \vec{B}$, donde \vec{B} es el campo en el interior del vórtice. Esta fuerza por lo tanto es perpendicular a la corriente y los vórtices se moverán en dicha dirección. Supongamos que los vórtices se mueven con una velocidad \vec{v} . Esto va a inducir un campo eléctrico $\vec{E} \propto \vec{B} \times \vec{v}$, el cual es paralelo a \vec{J} : $\vec{E} \propto \vec{J}$. Esto no es más que la ley de Ohm. Pareciera que se destruyó la superconductividad. Sin embargo, esta resistencia eléctrica efectiva aparece solo si los vórtices se mueven. La presencia de defectos cristalinos hace que los vórtices no puedan moverse. Se dice entonces que los vórtices quedan "anclados" en los defectos. En este caso, la corriente eléctrica puede fluir alrededor de los vórtices sin fricción. De esta manera, obtener muestras con muchos defectos permite la construcción de materiales superconductores con altas corrientes críticas. Este es un tema de investigación actual de gran importancia tecnológica.

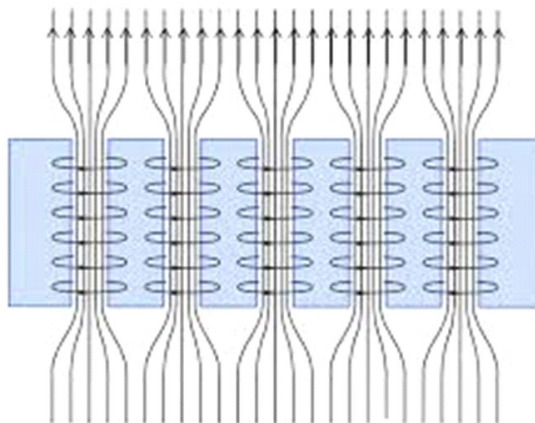


FIGURE 3.8: Penetración del campo magnético en el estado mixto de un superconductor tipo II.

3.7 Superconductividad de altas temperaturas

En los años 80 fueron descubiertos un nuevo tipo de superconductores de tipo II llamados superconductores de alta temperatura, los cuales presentan temperaturas críticas de que alcanzan 125 K. Estos son compuestos cerámicos (debido a su estructura cristalina) a base de tierras raras, cobre y oxígeno. El primero a ser descubierto en 1986 es el $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$. Para ciertos valores del dopado x , este material presenta una fase superconductora cuya temperatura crítica es de 30 K. Este valor superaba las predicciones teóricas de la época, basadas en la teoría BCS y abrió camino a la investigación de la superconductividad en este tipo de materiales. Por este descubrimiento G. Bednorz y A. Müller recibieron el premio Nobel de física un año después. Poco tiempo después se consiguió aumentar la temperatura crítica hasta los 60 K, reemplazando el material de dopado por Sr. Otras cerámicas superconductoras descubiertas con posterioridad fueron el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ($T_c = 92$ K), el $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$ ($T_c = 110$ K) y el de mayor temperatura crítica conocido hasta el presente $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$ ($T_c = 125$ K). Notemos que la temperatura crítica en estos tres últimos es superior a la de evaporación del nitrógeno líquido

(≈ 77 K), sustancia de relativamente fácil producción y manipulación en la actualidad. A diferencia de los llamados superconductores convencionales (es decir, los de bajas temperaturas), la teoría BCS no describe adecuadamente el comportamiento de estos materiales y hasta el presente no existe una descripción teórica completa para los mismos. Sin embargo, se sabe que el Cu y el O resultan fundamentales. Los átomos de estos elementos forman planos cristalinos paralelos en los cuales se forman los pares de Cooper responsables de la superconductividad. Así, la superconductividad en estos materiales es un fenómeno bidimensional.

3.8 Efecto Josephson

En 1962 B. D. Josephson, basándose en un análisis del efecto túnel de pares de Cooper entre dos electrodos superconductores separados por una barrera aislante fina (esto se conoce como una *juntura*), obtuvo una predicción notable: entre los superconductores se establece una supercorriente dada por

$$I_s = I_c \sin \Delta\varphi \quad (3.34)$$

donde $\Delta\varphi$ es la diferencia en la fase de la función de onda de LG entre ambos superconductores. I_c es la máxima corriente que la juntura puede soportar. Mas aún, predijo que, si se establece una diferencia de potencial constante V a través de la juntura, la diferencia de fase varía en el tiempo como

$$\frac{d\Delta\varphi}{dt} = \frac{2eV}{\hbar}, \quad (3.35)$$

es decir, un voltaje continuo produce una corriente alterna de amplitud I_c y frecuencia angular $\omega = 2eV/\hbar$. Por lo tanto, el quantum de energía $\hbar\omega$ corresponde al cambio energía $2eV$ que resulta de transferir un par de Cooper a través de la juntura. Estos resultados, Ecs.(3.34) y (3.35), se conocen como **efecto Josephson** DC y AC respectivamente y han sido ampliamente verificados experimentalmente. B. D. Josephson recibió el premio Nobel de física por esta contribución en 1973 (junto con L. Esaki e I. Giaever). El efecto Josephson AC se utiliza, entre otras cosas, para elaborar patrones de tensión eléctrica.

Si bien esta predicción fue hecha originalmente para dos electrodos superconductores separados por una capa aislante, puede verse que el efecto es mucho mas general y ocurre siempre que tengamos dos electrodos masivos separados por una "unión débil". Esto puede significar a) una capa aislante (como propuesto por Josephson), b) una capa delgada de metal normal, la cual se vuelve débilmente superconductora por la difusión de pares de Cooper desde los

3.8. EFECTO JOSEPHSON

superconductores (esto se conoce como efecto de proximidad) o c) simplemente una constricción en el material superconductor. Todos estos casos se conocen como *junturas Josephson*.

Podemos derivar el efecto Josephson DC a partir de la teoría de LG considerando un modelo simplificado de una unión débil. Esto es, consideramos dos superconductores masivos, separados por una unión corta unidimensional (o “puente”) de longitud $L \ll \xi$, hecho del mismo material superconductor. La ecuación de LG para el caso unidimensional toma la forma (3.24)

$$\xi^2 \frac{d^2 \phi}{dz^2} + \phi - \phi |\phi|^2 = 0$$

donde $\phi = \Psi/\Psi_\infty$. Asumimos que los electrodos están en equilibrio, de manera que $|\phi| = 1$ en ambos, pero la fase puede ser diferente. Dado que la fase absoluta de la función de onda esta indefinida, podemos asumir sin pérdida de generalidad que las fases en cada electrodo son 0 y $\Delta\varphi$ respectivamente. Así, tenemos las condiciones de contorno para la ecuación anterior en el puente: $\phi = 1$ para $z = 0$ y $\phi = e^{i\Delta\varphi}$ para $z = L$. Debido a que $L \ll \xi$, el término de la derivada segunda en la ecuación domina completamente a los otros dos términos (estamos en la región de máxima variación de la solución). En este límite, el problema se reduce a la ecuación de Laplace $d^2\phi/dz^2 = 0$, cuya solución general es $\phi = a + bz$. Aplicando las condiciones de contorno en los extremos del puente obtenemos

$$\phi = (1 - z/L) + (z/L) e^{i\Delta\varphi} \quad (3.36)$$

Sea A el área transversal del puente, de manera que $I_s = J_s A$. Reemplazando la Ec.(3.36) en la ecuación de LG para la corriente (3.22) se obtiene la ecuación de Josephson (3.34) con

$$I_c = \frac{e\hbar\Psi_\infty^2}{m} \frac{A}{L} \quad (3.37)$$

Un análisis más elaborado de la teoría muestra que esta es efectivamente la corriente crítica del material. Supongamos ahora que tenemos un campo magnético uniforme aplicado perpendicular a la juntura, de manera que podemos asumir el potencial vector paralelo a la misma. Mas aún, vamos a asumir que el módulo de potencial vector A es constante a lo largo de la juntura. En este caso, la ecuación (3.24) se reemplaza por

$$\xi^2 \left(i \frac{d}{dz} + \frac{2\pi}{\Phi_0} A \right)^2 \phi - \phi + \phi |\phi|^2 = 0 \quad (3.38)$$

donde $\Phi_0 = h/2e$ es el quantum de flujo. Proponemos entonces

$$\phi(z) = \chi(z) e^{i\frac{2\pi}{\Phi_0} Az}$$

Reemplazando en la Ec.(3.38) obtenemos

$$\xi^2 \frac{d^2 \chi}{dz^2} + \chi - \chi |\chi|^2 = 0$$

que es idéntica a la ecuación para ϕ sin campo. Aplicando las mismas consideraciones que antes y las mismas condiciones de borde, llegamos a la solución:

$$\phi = e^{i\frac{2\pi}{\Phi_0} Az} \left[(1 - z/L) + (z/L) e^{i(\Delta\varphi - \frac{2\pi}{\Phi_0} AL)} \right] \quad (3.39)$$

la cual reemplazada en la Ec.(3.22) nos dá

$$I_s = I_c \sin \gamma \quad (3.40)$$

donde I_c viene dada por la Ec.(3.37) y $\gamma = \Delta\varphi - 2\pi/\Phi_0 AL$. Para el caso general en que \vec{A} no es constante en el puente puede verse que

$$\gamma = \Delta\varphi - \frac{2\pi}{\Phi_0} \int \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (3.41)$$

donde la última es una integral de línea sobre un camino entre los extremos del puente.

3.9 Aplicaciones

3.9.1 SQUID

Hemos visto que el flujo magnético altera la diferencia de fase entre los electrodos superconductores separados por una juntura Josephson (Ecs.(3.40) y (3.41)). Este efecto se utiliza para mediciones de campo magnético de alta sensibilidad. Un ejemplo de esto último son los dispositivos llamados SQUID (Superconducting Quantum Inteference Device). Estos se basan en dividir la corriente superconductor y hacerla pasar por dos junturas, como se muestra esquemáticamente en la figura⁵ 3.9. El defasaje producido por el campo magnético aplicado puede producir entonces interferencias destructivas entre las funciones de onda de los pares de Cooper (o equivalentemente, el parámetro de

⁵Esta no es la única configuración posible. Existen otros tipos de squid, algunos basados en junturas simples.

3.9. APLICACIONES

orden de LG), en forma análoga al fenómeno de interferencia óptica en una doble rendija. Podemos ver como funciona esto utilizando la teoría de LG.

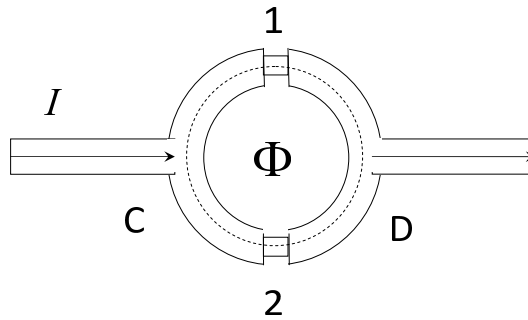


FIGURE 3.9: Diagrama esquemático de un SQUID de doble juntura.

En el dispositivo de la Fig.3.9 se aplica un campo magnético perpendicular al anillo superconductor. El flujo magnético a través del anillo Φ puede calcularse como

$$\Phi = \int \vec{B} \cdot d\vec{S} = \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}$$

donde la última es una integral de línea sobre el camino cerrado que pasa por el interior del anillo, como se indica en la Fig.3.9. Si las dimensiones de los electrodos C y D del anillo son grandes comparadas con la longitud de penetración λ , dentro de los mismos la corriente se anula $\vec{J}_s = 0$. De la Ec.(3.27) tenemos que dentro de los electrodos

$$\vec{A} = \frac{\hbar}{2e} \nabla \varphi = \frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla \varphi \quad (3.42)$$

y

$$\Phi = \frac{\Phi_0}{2\pi} \int_{\text{electrodos}} \nabla\varphi \cdot d\vec{l} + \int_{\text{junturas}} \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (3.43)$$

Dado que la fase φ debe ser univaluada, tenemos que

$$\int_{\text{electrodos}} \nabla\varphi \cdot d\vec{l} + \Delta\varphi_1 - \Delta\varphi_2 = 2n\pi$$

donde $\Delta\varphi_i$ son las diferencias de fase finitas a través de las junturas. Reemplazando en la Ec.(3.43) y usando la definición (3.41) tenemos que

$$\gamma_2 - \gamma_1 = 2\pi \left(\frac{\Phi}{\Phi_0} - n \right) \quad (3.44)$$

Suponiendo que ambas junturas son idénticas, tenemos que

$$I = I_1 + I_2 = I_c(\sin \gamma_1 + \sin \gamma_2) = I_c \left(\sin \gamma_1 + \sin \left[\gamma_1 - 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right] \right) \quad (3.45)$$

Maximizando la expresión anterior respecto de γ_1 podemos obtener la máxima corriente que pasa por el dispositivo, esto es

$$I_{max} = 2I_c \left| \cos \pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right| \quad (3.46)$$

que tiene la misma forma que el correspondiente patrón de interferencia óptico en una doble rendija. Así, midiendo corrientes podemos detectar variaciones del flujo magnético que son del orden del quantum de flujo Φ_0 . Dado que este último es muy pequeño

$$\Phi_0 = \frac{h}{2e} \approx 2.068 \times 10^{-15} \text{ Wb}, \quad (3.47)$$

y recordando que $1 \text{ Wb} = 1 \text{ T m}^2$, una variación del flujo Φ_0 en un anillo de 1 cm^2 equivale a una variación del campo B del orden de 10^{-11} T . De hecho, variaciones mas sofisticadas de este dispositivo permiten medir fracciones de Φ_0 . A los efectos de comparación, el campo magnético terrestre en la superficie de la tierra varía entre 25 y $65 \mu\text{T}$. Vemos así que estos dispositivos permiten medir campos magnéticos extremadamente pequeños.

3.9.2 Transmisión de energía

Esta es la aplicación mas obvia de la superconductividad. Poder transmitir energía eléctrica prácticamente sin perdidas es altamente deseable en una sociedad tecnológica. No obstante, reemplazar los cables normales por cables superconductores a gran escala esta lejos de ser viable. Los problemas tecnológicos son muchísimos. Vamos a enumerar solo algunos de los principales.

La primera dificultad es la baja temperatura. Los superconductores cerámicos no soportan (hasta ahora) corrientes muy elevadas y por lo tanto no resultan prácticos aún para estas aplicaciones. Esto hace que deba utilizarse He líquido para alcanzar temperaturas inferiores a la crítica (el He licúa a temperatura inferiores a los 4 K a presión normal). El He es un elemento raro, caro y de difícil manipulación. Así, deben emplearse técnicas sofisticadas de criogenia (en general basadas en el uso adicional de nitrógeno líquido externo) para reducir la pérdidas. Otro problema es que, para fabricar un cable el material debe ser suficientemente maleable. Algunos de los materiales con las mejores propiedades superconductoras son frágiles. Así, debe buscarse un compromiso entre propiedades eléctricas y mecánicas.

Los materiales mas usados en la actualidad para construir cables superconductores son aleaciones a base de Niobio, tales como NbTi y Ni_3Sn . Este último soporta campos de hasta 10T simultaneamente con una densidad de corriente de 10^3 A/mm² (recordemos que cables domiciliarios de 1 mm² soportan una corriente máxima de 2 A sin quemarse). Las propiedades superconductoras del NbTi son inferiores a las del anterior, pero es mas maleable, con lo cual es el mas utilizado.

Otro problema consiste en la manufactura de materiales con un alto anclaje de vórtices para evitar la resistencia producida por el movimiento de los vórtices.

Finalmente, existe otro fenómeno que eleva enormemente el costo de los cables. Supongamos que por algún motivo se eleva la temperatura del material por encima de la crítica mientras transporta una corriente elevada (por ejemplo, por una evaporación abrupta del He). En su fase normal, estos materiales son unos conductores bastante pobres, con una resistencia eléctrica bastante mas alta que la de un buen conductor como el Cu. La aparición abrupta de resistencia eléctrica involucra la disipación de una cantidad enorme de calor y el cable se funde. Para evitar esto el cable superconductor (en realidad es un manojo de cables) se encuentra inserto en una matriz de Cu. Así, ante una transición abrupta a la fase normal, el Cu actúa como una resistencia en paralelo mucho menor que la del cable principal, derivando la mayor parte de la corriente (un cortocircuito) con una disipación razonable evitando que el dispositivo se destruya. Todo esto eleva enormemente el costo de fabricación. En la actualidad un kilo de cable

superconductor cuesta alrededor de 1000 veces mas que un kilo de cable de Cu.

3.9.3 Electroimanes superconductores

Por los motivos expuestos anteriormente, el uso de cables superconductores para transmisión en líneas eléctricas se encuentra a nivel de prototipo. Sin embargo, estos cables pueden utilizarse en dispositivos específicos. El uso más difundido en la actualidad es la generación de grandes campos magnéticos mediante electroimanes superconductores, tales como los utilizados en aceleradores de partículas y en tomógrafos de Resonancia magnética Nuclear (los tomógrafos de uso medicinal requieren de campos entre 1 y 2 T, los cuales difícilmente se pueden generar a un costo razonable mediante conductores normales).

3.9.4 Levitación magnética

Uno de los fenómenos más vistosos asociados a la superconductividad es el de la levitación magnética. Esto es un resultado directo del efecto Meissner. Supongamos que tenemos una placa superconductora grande horizontal y colocamos encima un imán normal. En el superconductor se van a generar corrientes que crean un campo magnético interno que cancela exactamente el campo del imán dentro del material (efecto Meissner). Pero hacia afuera del material, estas corrientes equivalen a tener un segundo imán, que es una imagen especular del imán real. Como resultado, este imán virtual repele el imán real, con una fuerza que eventualmente equilibra al peso y el imán flota (levita) por encima de la superficie. En la práctica, esta es en general una situación inestable y se requiere de una geometría particular del superconductor para que la levitación realmente ocurra, al menos en superconductores tipo I. Sin embargo, en el caso de superconductores tipo II el anclaje de vórtices provee una estabilidad adicional y la levitación se obtiene fácilmente. De hecho, la levitación magnética puede obtenerse mediante materiales normales, pero requiere de configuraciones de campo bastante más sofisticadas.

Una aplicación de este fenómeno son los trenes de levitación magnética o MAGLEV (la sigla viene de MAGnetic LEVitation). Estos trenes levitan a cierta altura de los rieles y a la vez son propulsados mediante campos magnéticos. Una de las versiones actuales (en Japón) se basa en el uso de rieles superconductores. La ausencia de fricción con los rieles permite alcanzar altas velocidades.

3.10 Bibliografía recomendada

- M. Tinkham, Introduction to Superconductivity, 2nd Ed., McGraw Hill (1996).
- L. E. Reichl, A Modern Course in Statistical Physics, 1st Ed., University of Texas Press (1980).
- V. L. Ginzburg and E. A. Andryushin, Superconductivity, World Scientific (2004).

Parte III

Información Cuántica

CAPÍTULO 4

INFORMACIÓN CUÁNTICA

4.1 Introducción

Este capítulo tiene el propósito de introducir algunos aspectos fundamentales de la dinámica de sistemas cuánticos correlacionados, que involucran conceptos básicos tales como entrelazamiento, correlaciones cuánticas y no-localidad. Estas nociones, que en principio pertenecen a los fundamentos de la teoría cuántica, también están en la base de aplicaciones actuales ya que la correlación cuántica es un recurso indispensable para los diferentes protocolos de información cuántica. Entonces la familiarización con estas ideas nos ayudará a incorporar el lenguaje básico utilizado en este campo, y paralelamente brindará un estímulo para la profundización de nuestra percepción sobre aspectos epistémicos asociados con la descripción cuántica de la naturaleza.

La naturaleza cuántica del mundo ha sido motivo de debates interesantísimos desde el primer momento en que los hechos de la naturaleza comenzaron a explicarse mediante la teoría cuántica. Paralelamente a los avances ocurridos en diversos campos impulsados por las nuevas ideas (física atómica y molecular, física del estado sólido, física nuclear, etc.), surgió un gran interés epistemológico motivado en la “extrañeza” de los nuevos postulados. Estas discusiones no sólo se circunscribieron al mundo de la física, sino que tuvieron su contrapartida en el campo de la filosofía. Si bien el poder predictivo de la nueva teoría no dejaba lugar a dudas, surgieron opiniones muy divergentes acerca de la interpretación de la teoría.

Dado que el objeto de los nuevos postulados es esencialmente el mundo microscópico sobre el que subyace nuestro mundo cotidiano, la intuición

4.1. INTRODUCCIÓN

clásica, alimentada por los éxitos contundentes de las teorías de la mecánica clásica y el electromagnetismo, en muchos casos obstaculizó la discusión de los fundamentos de la nueva teoría. El problema surge al aceptarse ciertas hipótesis o “postulados” no contenidos en la teoría cuántica (como el de localidad), justificados solamente en base a ideas aceptadas como válidas en la descripción del régimen clásico. La controversia más famosa la representó el argumento de Einstein, Podolsky y Rosen (EPR).

La discusión sobre estas propiedades de los sistemas cuánticos arranca esencialmente desde el trabajo de Einstein, Podolsky y Rosen, conocido como paradoja o argumento de EPR. En un artículo del año 1935, mediante un argumento basado en un experimento hipotético, estos autores cuestionaron seriamente la validez de la interpretación de la mecánica cuántica aceptada en ese momento, sugiriendo que, a pesar de los logros en la explicación de numerosos fenómenos no descriptibles clásicamente, la mecánica cuántica no podía ser una teoría completa, debiendo ser suplementada asumiendo la existencia de variables adicionales, no contenidas en la función de onda ¹.

La propuesta de EPR está basada esencialmente en dos conceptos muy razonables dentro de la física clásica: *realismo* y *localismo*. Esto es, se asume la existencia de una realidad independiente del acto de medir y que cualquier observación realizada sobre un sistema dado no tiene ningún efecto sobre otro sistema que se encuentre muy alejado, aunque ambos hayan interactuado en el pasado. Ellos analizaron un sistema compuesto por dos partículas separadas espacialmente pero que han interactuado en el pasado de acuerdo a las reglas de la mecánica cuántica. Asumiendo las hipótesis de realismo y localismo concluyeron que midiendo sobre sólo una de ellas es posible anticipar el resultado de diferentes experimentos sobre la segunda partícula, en contradicción con una descripción mecánico-cuántica de los sistemas asociados.

Esta publicación motorizó un fuerte desarrollo de la investigación relativa a la interpretación de la mecánica cuántica. Durante mucho tiempo la discusión se desarrolló solamente en el plano ‘verbal’, es decir sin un correlato matemático del formalismo de la mecánica cuántica que permitiera poner a prueba las hipótesis fundamentales de manera cuantitativa. Sin esta herramienta no era posible generar un procedimiento experimental capaz de contrastar las distintas propuestas teóricas. En 1964, J.S. Bell enunció un teorema que afirma que

¹A. Einstein, A., Podolsky, B., Rosen, N, *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?* Phys. Rev. 47 777 (1935). Este trabajo está basado en un experimento hipotético que involucra variables de momento y posición de las partículas. D. Bohm, en su libro *Quantum Mechanics* (Prentice Hall 1951) presenta una versión en términos de variables de espín que permite un tratamiento matemático del razonamiento más directo. Este último tratamiento es el que seguiremos en estas notas.

ninguna teoría *local y realista* puede predecir resultados idénticos a los dados por la mecánica cuántica estándar. El razonamiento de Bell deriva en una desigualdad que pone límites a los resultados obtenidos en base al realismo local y que es violada por el resultado cuántico normal. A partir de entonces, se sucedieron muchos experimentos, fundamentalmente de óptica cuántica, basados en el estudio de correlaciones cuánticas en fotones entrelazados.

Recién en la década de 1970, el desarrollo tecnológico creciente hizo posible que los ‘experimentos pensados’ de los años treinta se concretaran en los laboratorios, facilitando así la profundización del conocimiento sobre la esencia cuántica de la naturaleza. Los resultados de los experimentos realizados para poner a prueba la desigualdades de Bell vienen demostrando que no es posible una teoría realista con carácter local, y que a la vez prediga los mismos resultados de la mecánica cuántica. La corroboración definitiva de desigualdades del tipo de las desigualdades de Bell que han surgido a través del tiempo, incluyendo las que consideran la posibilidad de teorías *no-locales realistas*^{2 3}, probablemente terminarán de confirmar a la mecánica cuántica como una teoría completa.

Estos avances son de gran importancia tanto en el nivel académico o filosófico, como en aplicaciones tales como criptografía y teleportación cuánticos. La posibilidad de construir una computadora cuántica está también en este camino, aunque en tal caso las dificultades técnicas a vencer para lograr resultados de interés práctico aún no son fáciles de resolver. Sin embargo, los avances obtenidos son de un gran nivel conceptual, mostrando cuán profundamente difieren las teorías clásica y cuántica, y planteando interrogantes de carácter básico en el nuevo campo de investigación de los sistemas cuánticos abiertos⁴.

En este capítulo discutiremos los procesos de correlación cuántica que se generan en sistemas de dos partículas que han interactuado en el pasado, siguiendo los postulados de la mecánica cuántica estrictamente, sin el agregado de hipótesis de realismo y localidad. Por otro lado, analizaremos el razonamiento que conduce a la desigualdad de Bell, que debe ser satisfecha por un sistema regido por leyes físicas basadas en el realismo y la localidad. Finalmente, mostraremos que dicha desigualdad no se satisface siempre si el problema es analizado cuánticamente, llegando a concluir que la cuántica tal como la conocemos hoy no es una teoría local-realista. El concepto de ‘desigualdades de Bell’ permite aspirar a discernir experimentalmente sobre la completitud de la descripción brindada por la mecánica cuántica. La discusión se hace utilizando

²Nonlocal Hidden-Variable Theories and Quantum Mechanics: An Incompatibility Theorem A. J. Leggett, *Found. of Phys.*, 33, 1469 (2003).

³Gröblacher, et al., *An experimental test of non-local realism*, *Nature*, 446, 871 (2007).

⁴H.P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford (2002)

4.1. INTRODUCCIÓN

el operador densidad ó ‘matriz densidad’, introducido originalmente en la teoría cuántica por von Neumann en 1927 para describir conceptos estadísticos en casos en los que no se dispone del máximo conocimiento posible. Introduciremos además el operador densidad reducido como el ente necesario para describir un sistema cuántico abierto, es decir un sistema observado que a su vez interactúa con otro sistema cuántico no-observado.

El concepto de sistema cuántico abierto tiene una connotación más general, ya que el acoplamiento de un sistema cuántico observado con un ambiente también cuántico, es el origen de la dinámica irreversible del sistema de interés, a lo largo de diversas escalas de tiempo que van desde la decoherencia cuántica hasta la relajación que lleva al sistema al equilibrio térmico. A manera de ilustración de estas ideas, incluiremos el ejemplo de decoherencia cuántica adiabática de un qubit acoplado con un baño de bosones. El argumento de EPR y la dinámica de sistemas acoplados con ambientes cuánticos son ejemplos en los que la no-separabilidad juega un papel preponderante en la dinámica de los sistemas que han interactuado en el pasado.

La discusión de los conceptos seleccionados en este capítulo pretende habilitar al lector para introducirse en la literatura contemporánea referida a correlación cuántica y procesamiento cuántico de la información.

4.1.1 Argumento de Einstein, Podolsky y Rosen (EPR)

En el trabajo de EPR, los autores plantearon que la descripción de la realidad física provista por la mecánica cuántica podía ser incompleta. Argumentaron que es posible visualizar situaciones físicas en las que es posible identificar ‘elementos de realidad’ que no tienen contrapartida en la mecánica cuántica.

Supongamos que tenemos un sistema de dos partículas con espín $1/2$, por ejemplo dos átomos conformando una molécula, en un estado en el cual el espín total es cero. Supongamos que la molécula es desintegrada por medio de algún proceso que no modifica el espín. Los dos átomos comenzarán a separarse y pronto dejarán de interactuar apreciablemente, manteniendo el valor del espín total en cero.

Si el espín fuera una variable clásica de momento angular, interpretaríamos este proceso de la siguiente manera. Mientras los átomos conformaban una molécula, cada componente del momento angular de cada átomo tendría un valor definido, que sería siempre opuesto al del otro átomo, de forma tal que el momento angular total sea nulo. Al separarse los átomos, cada uno seguiría teniendo cada componente del momento angular opuesta a las correspondientes componentes del otro. Los vectores de momento angular de ambos átomos estarían entonces correlacionados. Esta correlación surgió debido a la interacción

entre las partículas cuando conformaban la molécula con espín total igual a cero, pero cuando los átomos se separan las ecuaciones de movimiento deterministas mantienen la correlación entre cada una de las componentes del momento angular, debido a la conservación del momento angular total. Supongamos que ahora medimos el momento angular de una de las partículas. Debido a la existencia de la correlación se puede concluir inmediatamente que el vector de momento angular de la otra partícula es opuesto al de la primera. De esta manera, es posible medir el momento angular de una partícula indirectamente, midiendo el momento de la otra.

Ahora consideremos este problema desde el punto de vista de la teoría cuántica. La función de onda del sistema de dos partículas de espín 1/2 en el estado de espín total cero, expresada en términos de los autoestados de las componentes z del momento angular de espín, es de la forma:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_z |-\rangle_z - |-\rangle_z |+\rangle_z), \quad (4.1)$$

es decir una superposición de dos estados en los que las partículas tienen espín definido y opuesto a lo largo de la dirección de cuantización, digamos z . Aunque es posible medir cualquiera de las tres componentes, x, y ó z , en este caso no es posible medir más de una componente en un único experimento. Sin embargo, cualquiera sea la componente que se mida, los resultados de ambas partículas están correlacionados. Así, cuando las partículas dejaron de interactuar y se mide la componente z de la partícula 1 (en un experimento de Stern-Gerlach), de acuerdo con la mecánica cuántica el resultado no está predeterminado, pero podemos predecir el resultado que obtendríamos al medir la misma componente de la partícula 2. Esto significa que podríamos determinar una componente del momento angular de espín de una partícula sin medirla, evitando la correspondiente perturbación que la medición implica en el dominio cuántico. De acuerdo con las premisas del argumento de EPR, la componente z del momento angular de espín de la partícula 2 constituye un *elemento de realidad*, independientemente de nuestra medición.

Debido a la simetría de (4.1), la función de onda adopta la misma forma cuando se la expresa en diferentes bases asociadas con distintas direcciones de cuantización, es decir

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle_x |-\rangle_x - |-\rangle_x |+\rangle_x). \quad (4.2)$$

Entonces, cambiando la dirección del aparato de Stern-Gerlach podríamos anticipar el resultado de la componente x del momento angular de la partícula 2 midiendo sobre la partícula 1. Generalizando este razonamiento, concluimos

4.1. INTRODUCCIÓN

que podríamos determinar cualquier componente del momento angular de la segunda partícula sin que ningún agente físico actúe sobre ella.

La consecuencia del argumento sería que todas las componentes del espín de cada partícula están definidas, lo cual contradice la teoría cuántica. Así, concluiríamos que la descripción provista por la teoría cuántica es incompleta, y deberíamos buscar una teoría que contemplara la existencia de otras variables, capaz de brindar una descripción completa de los fenómenos físicos (teoría de 'variables escondidas'). El argumento que plantea esta contradicción es conocido en la literatura como la *paradoja de EPR*.

Sin embargo, para comprender el origen de esta paradoja, notemos que la conclusión recién enunciada depende de que consideremos válidos dos aspectos de la naturaleza que en el mundo clásico parecen obvios, pero que de ninguna manera podrían darse por ciertos en el mundo cuántico, como veremos más adelante. EPR plantearon este argumento, basados en las siguientes premisas⁵:

(i) Algunas de las predicciones de la mecánica cuántica sobre observaciones relacionadas con un sistema de dos partículas separadas espacialmente son correctas.

(ii) *Realismo*: Si el valor de una cantidad física puede ser predicho con certeza (i.e. probabilidad igual a uno) sin perturbar de ninguna manera al sistema observado, entonces existe un elemento de realidad física correspondiente a esta cantidad física. Es decir, mediante el realismo se afirma la existencia de una realidad que tiene propiedades definidas independientemente de las capacidades humanas de representación.

(iii) *Localidad*: No existe acción a distancia en la naturaleza. El concepto de localidad establece que la elección de la medida que se realiza sobre una de las partículas no puede influir en las propiedades de la otra.

Entonces, de acuerdo con la hipótesis de realismo, las partículas poseen atributos definidos con independencia de ser o no observadas. La suposición de localidad implica que el resultado de una medición sobre un sistema no puede ser afectado por operaciones hechas sobre un sistema distante, con el cual ha interactuado en el pasado. En el ejemplo discutido arriba, las tres componentes del vector momento angular serían elementos de realidad, de acuerdo con la definición dada más arriba, lo que estaría en contradicción con los postulados de la mecánica cuántica, de acuerdo a los cuales no es posible un estado cuántico en la que más de una componente del momento angular esté determinada.

La necesidad de encontrar una teoría que pudiera describir la naturaleza

⁵Ver por ejemplo J.F. Clauser and A. Shimony, Rep. Prog. Phys. 41, 1881 (1978). D. Bohm, *Quantum theory*, 1951.

microscópica bajo las premisas (i) y (ii) llevó a sugerir la existencia de variables ocultas que completan la descripción de los fenómenos dada por la función de onda, pero sin alterar la predictibilidad que ya posee la actual teoría cuántica. La existencia de estas variables restablecerían el determinismo, ausente en la versión 'ortodoxa' de la mecánica cuántica ⁶.

Durante mucho tiempo este problema solamente pudo ser discutido a nivel filosófico dado la falta de un experimento que pudiera despejar los interrogantes. La situación cambió drásticamente a partir de 1964, año en que se publicó el famoso trabajo de J.S. Bell ⁷ en donde el autor propuso una restricción en forma de una desigualdad que debe satisfacer una teoría si la naturaleza responde a las premisas anteriores. Veremos que esta desigualdad puede ser violada por un estado cuántico, por lo que la mecánica cuántica es incompatible con una visión local realista. Es decir, que no existe ninguna teoría local-realista que reproduzca todas las predicciones de la mecánica cuántica. Tests experimentales han encontrado repetidamente acuerdo con la mecánica cuántica, contradiciendo el punto de vista de las teorías locales.

4.2 Estados cuánticos puros y mezclas estadísticas

La controversia planteada por EPR se refiere a los fundamentos mismos de toda teoría que pretenda explicar la naturaleza, como la mecánica cuántica. Por ello, es importante comenzar con una revisión de los postulados sobre los que se basa la teoría cuántica. Con ese fin, seguiremos el tratamiento presentado por K. Blum ⁸, quien describe de manera muy eficiente el formalismo de la matriz densidad, indispensable para poder tratar sistemas que han interactuado con otro sistema no observado.

En primer lugar, para revisar los conceptos básicos de la mecánica cuántica, conviene recordar las definiciones de *estados puros* y *mezclas estadísticas*. Estos conceptos están referidos al grado de conocimiento que tenemos de un dado sistema cuántico. En mecánica clásica, la dinámica de un sistema puede en principio definirse con un **completo** grado de conocimiento determinando las velocidades y posiciones a un tiempo de todas las partículas que conforman el sistema. El estado del sistema a tiempos posteriores puede entonces conocerse con total certeza. Dado que generalmente sólo se dispone de valores medios de estas magnitudes, en la práctica se recurre a los métodos de la mecánica estadística. Contrariamente, la idea de máximo conocimiento en mecánica

⁶D. Bohm and Y. Aharonov, Phys. Rev. 108, 1070 (1957)

⁷J.S. Bell, Physics, 1, 195-200 (1964). J.S. Bell, Rev. Mod. Phys., 38, 447 (1966)

⁸K. Blum *Density Matrix Theory and Applications*, 3rd Ed., Springer (2012)

4.2. ESTADOS CUÁNTICOS PUROS Y MEZCLAS ESTADÍSTICAS

cuántica tiene un significado mucho más restringido debido a que no es posible medir simultáneamente con precisión todos los observables. Entonces analicemos el significado de “máxima información” en mecánica cuántica.

Se alcanza un estado cuántico de máximo conocimiento cuando es posible definir mediante experimentos adecuados una función de onda que sea autoestado de un conjunto completo de operadores (observables físicos) que caracterizan a un sistema particular. Si es posible encontrar un conjunto de operadores Hermitianos Q_1, Q_2, Q_3, \dots compatibles entre sí (es decir que conmutan entre ellos), cuyos autovectores comunes puedan ser caracterizados por los autovalores q , de tal forma que ningún par de autovectores $|q_{1,i}, q_{2,j}, q_{3,k}, \dots\rangle$ tenga autovalores exactamente idénticos, ese conjunto de operadores se denomina “completo”.

Analicemos este proceso con mayor detalle. Consideremos un operador Hermitiano, Q_1 , que no posee una única base debido a cierta degeneración de sus autovalores. Si Q_2 es otro observable que conmuta con Q_1 , entonces estos operadores tienen una base común. Puede suceder que posean una única base común, en cuyo caso ambos operadores conforman un conjunto completo. Si en cambio Q_1 y Q_2 no comparten una base única, se puede intentar completar el conjunto con un tercer observable Q_3 compatible con los anteriores, y así, los autovalores q_1, q_2 y q_3 pueden ser usados para dar una clasificación del sistema con una precisión creciente. Más generalmente decimos que los observables Q_1, Q_2, Q_3, \dots , conforman un conjunto completo de observables compatibles si ellos poseen una y sólo una base común. En ese caso, cualquier otro observable que conmute con cada uno de los miembros del conjunto completo, tiene necesariamente a este conjunto como base (por ejemplo una función de los observables anteriores). Sus autovalores son funciones bien definidas de los autovalores $q_{1,i}, q_{2,j}, q_{3,k}, \dots$ del conjunto Q_1, Q_2, Q_3, \dots . Si se realizan mediciones simultáneas de los valores asumidos por esas variables, se puede asegurar que la función de onda del sistema es una autofunción de los observables del conjunto completo, con los autovalores correspondientes a la operación de la medición (llamaremos “preparación” a este procedimiento). Dado que existe sólo una autofunción que posea estas propiedades, la especificación de esas mediciones define la función de onda del sistema físico. El estado del sistema queda entonces completamente especificado dando los números cuánticos $q_{1,i}, q_{2,j}, q_{3,k}, \dots$, es decir, asignándole el vector $|q_{1,i}, q_{2,j}, q_{3,k}, \dots\rangle$. Si en estas condiciones se repiten mediciones de Q_1, Q_2, Q_3, \dots , estamos seguros de obtener siempre los autovalores mencionados ⁹. *Estos*

⁹Una discusión sobre estos puntos puede encontrarse en textos de mecánica cuántica tales como: A. Messiah, *Quantum Mechanics, Vol I*, North Holland (1961), E. Merzbacher, *Quantum*

estados de máximo conocimiento se denominan estados puros.

En otras palabras, el conjunto más grande de operadores que conmutan mutuamente que pueda ser encontrado, dará la caracterización más completa posible del sistema. La medición de otra variable que no conmute con el conjunto anterior introducirá una incerteza en al menos uno de los observables anteriores. Entonces, la máxima información que puede ser obtenida de un sistema en mecánica cuántica, es el conjunto de autovalores $q_1, q_2 \dots$ de un conjunto completo de observables que han sido medidos (experimento completo). El sistema queda entonces especificado completamente al asignársele el vector de estado $|q_1, q_2, \dots\rangle$. Este sería por ejemplo el caso de un haz de electrones que puede ser preparado mediante filtros adecuados, en un estado puro con momento y número cuántico magnético bien definidos, $|\mathbf{p}, m\rangle$. Es decir, un autoestado de \mathbf{p} y S_z .

La elección de un conjunto completo no es única. Por ejemplo, en lugar de expandir un estado puro de una partícula en términos de los autoestados $|\mathbf{p}, m\rangle$ del operador momento y de S_z , pueden usarse los autoestados del operador momento y de $S_{z'}$, $|\mathbf{p}, m'\rangle$, donde z y z' son distintas direcciones. Consideremos dos conjuntos de observables $\{Q_i\}$ y $\{Q'_i\}$, $i = 1, 2, \dots$, que no conmutan entre sí, que tienen autoestados $|\psi\rangle = |q_1, q_2, \dots\rangle$ y $|\phi\rangle = |q'_1, q'_2, \dots\rangle$, respectivamente. Si un sistema está en un estado representado por $|\psi\rangle$, podemos expandirlo como una superposición lineal de todos los autoestados de los operadores $\{Q'_i\}$, es decir ¹⁰

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle. \quad (4.3)$$

Esta expresión representa el principio de superposición de la mecánica cuántica: cada cantidad física (un conjunto completo) puede ser representada por un operador (conjunto de operadores) Hermitiano con autofunciones $|\phi_n\rangle$, y cada estado físico $|\psi\rangle$ (no necesariamente autoestado de $\{Q'_i\}$) puede ser expandido en términos de $|\phi_n\rangle$. Los estados particulares $|\phi_n\rangle$ que se han elegido para expandir al estado $|\psi\rangle$ constituyen una base ortonormal y completa:

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad (4.4)$$

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1. \quad (4.5)$$

De la ortonormalidad surge que $a_n = \langle \phi_n | \psi \rangle$. Se dice que $|\psi\rangle$ se expresó en la

Mechanics, 3er Edición (1961), L. Landau y E.M. Lifschitz, *Mecánica Cuántica No Relativista*

¹⁰Esta es una generalización de lo que escribimos en el caso de espines 1/2: $|\chi\rangle = c_1 |\alpha\rangle + c_2 |\beta\rangle$

4.2. ESTADOS CUÁNTICOS PUROS Y MEZCLAS ESTADÍSTICAS

representación $\{|\phi_n\rangle\}$. Asumiendo la normalización de $|\psi\rangle$, obtenemos

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_n |a_n|^2 = 1, \quad (4.6)$$

donde $|a_n|^2$ es la probabilidad de que en una medición se encontrará al sistema en el estado $|\phi_n\rangle$. De la Ec.(4.3) vemos que un estado puro puede estar caracterizado de dos maneras:

- (a) dando los autovalores q_1, q_2, \dots de un conjunto completo de operadores, ó
- (b) en términos de las amplitudes de probabilidad a_n que determinan $|\psi\rangle$ en términos de las autofunciones $|\phi_n\rangle$ de otro conjunto de observables. En el caso de espín 1/2, un estado puro general de la forma $|\chi\rangle = c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle$ corresponde a un vector de polarización \mathbf{P} a lo largo del cual “apuntan” los espines, es decir que es un autoestado del observable $\mathbf{S} \cdot \hat{n}$, donde \hat{n} es el versor de la dirección de \mathbf{P} .

En un ensamble de partículas en estado puro $|\psi\rangle$ arbitrario, las mediciones de un observable Q arrojarán una variedad de resultados, cada uno correspondiente a un autovalor del operador Q . El valor medio de los resultados obtenidos luego de muchas mediciones es el valor de expectación

$$\langle Q \rangle = \langle\psi|Q|\psi\rangle. \quad (4.7)$$

Si el observable medido pertenece al conjunto completo de experimentos del estado $|\psi\rangle$ el resultado de la medición siempre dará el mismo valor. Caso contrario, se obtendrán los autovalores de Q , con una dispersión dada por la función de onda.

En general, rara vez puede lograrse una preparación completa de un sistema, dado que en la mayoría de los casos las variables dinámicas medidas durante la preparación no constituyen un conjunto completo. Por ejemplo, mediante filtros adecuados puede lograrse que todos los miembros de un haz de átomos emitido por un horno a temperatura T posean un momento \mathbf{p} definido. Sin embargo, si no se efectúa ninguna preparación especial el estado de espín de cada una de ellas estará distribuido estadísticamente. En casos como éste, al sistema de interés solamente puede asignársele una mezcla estadística de estados, cada uno de ellos caracterizados por un peso estadístico, que dependerá de la preparación. Debido a ello, la descripción del estado consiste en dar ciertas probabilidades W_1, W_2, \dots de encontrarse, por ejemplo, en estados puros $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \dots$, respectivamente. En estos casos, entonces, es necesario usar una descripción estadística en el mismo sentido de la mecánica estadística clásica. Los estados que no pueden ser caracterizados por un único vector de estado son llamados *mezclas estadísticas*. En este caso, no existe un conjunto completo de mediciones que conduzcan a resultados unívocamente predecibles.

Consideremos ahora una mezcla estadística general, con componentes $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$. Los miembros de este conjunto no son necesariamente ortogonales entre sí, y participan de la mezcla con probabilidades W_n , como producto de la preparación del sistema. El valor de expectación del observable Q es ahora

$$\langle Q \rangle = \sum_n W_n \langle \psi_n | Q | \psi_n \rangle . \quad (4.8)$$

En la ecuación anterior, la estadística entra de dos formas muy diferentes: (i) En los valores de expectación de los estados individuales que conforman el ensamble mixto. Este promedio está conectado con las perturbaciones efectuadas al sistema durante las mediciones, y es inherente al carácter cuántico, y (ii) en el promedio de estos valores de expectación, sobre el ensamble de la mezcla. Este promedio es del tipo del que se realiza en mecánica estadística clásica. Veremos que estos valores de expectación pueden ser calculados con las técnicas de la matriz densidad.

4.2.1 Operador densidad (matriz densidad). Propiedades básicas

Debido a que en el caso de mezclas estadísticas ya no es posible describir la evolución del estado de un sistema físico mediante un vector de estado que satisface la ecuación de Schrödinger, es útil definir una magnitud que permita el cálculo del valor de expectación 4.8 de manera sistemática y cuya dinámica pueda ser deducida a partir de una ecuación diferencial. Por otro lado, como se verá enseguida, la dinámica cuántica de un subsistema observado que forma parte de un sistema compuesto no puede ser descrita generalmente por un vector de estado, por lo que es necesario definir un nuevo concepto que contenga la información estadística asociada al desconocimiento sobre el estado del sistema observado así como el carácter probabilístico esencial de la mecánica cuántica¹¹.

Supongamos una mezcla estadística arbitraria, de estados preparados independientemente, $\{|\psi_n\rangle\}$, $n = 1, 2, \dots$, con pesos estadísticos W_n . Definimos el *operador densidad*

$$\rho \equiv \sum_n W_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| . \quad (4.9)$$

A partir de esta definición, es directo comprobar que el valor de expectación de un observable Q es

$$\langle Q \rangle = \text{Tr}(\rho Q) . \quad (4.10)$$

¹¹Aquí resulta esclarecedora la discusión dada en el complemento EIII del texto Quantum Mechanics vol I de C. Cohen Tannoudji, B. Diu and F. Laloe, referido al operador densidad.

4.2. ESTADOS CUÁNTICOS PUROS Y MEZCLAS ESTADÍSTICAS

Es decir, la matriz densidad contiene toda la información significativa físicamente sobre el sistema.

Para expresar matricialmente este operador, es conveniente expandir cada estado del ensamble en una base ortonormal de estados, $|\psi_n\rangle = \sum a_m^{(n)} |\phi_m\rangle$, con lo que resulta

$$\rho = \sum_{n,m,m'} W_n a_{m'}^{(n)} a_m^{(n)} |\phi_{m'}\rangle \langle \phi_m| \quad (4.11)$$

y la representación matricial

$$\langle \phi_i | \rho | \phi_j \rangle = \sum_n W_n a_i^{(n)} a_j^{(n)*}. \quad (4.12)$$

La matriz densidad tiene las siguientes propiedades (que se sugiere verificar como ejercicio):

1. Hermiticidad: $\langle \phi_i | \rho | \phi_j \rangle = \langle \phi_j | \rho | \phi_i \rangle^*$
2. Los elementos diagonales, $\rho_{mm} = \sum_n W_n |a_m^{(n)}|^2 \geq 0$, representan la probabilidad de hallar al sistema en el estado $|\phi_m\rangle$.
3. La cantidad $W(\psi) \equiv \langle \psi | \rho | \psi \rangle = \sum_n W_n \langle \psi | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle = \sum_n W_n |\langle \psi | \psi_n \rangle|^2 \geq 0$ es la probabilidad de hallar al sistema en el estado $|\psi\rangle$ después de una medición (positividad).
4. Normalización: $\text{Tr} \rho = 1$.
5. En un estado puro, $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$, y se cumple $\text{Tr} \rho^2 = (\text{Tr} \rho)^2 = 1$.
6. En un estado mezcla se cumple $\text{Tr} \rho^2 < 1$.

4.2.2 Ecuación de Liouville-Von Neumann

En un sistema cerrado, la ecuación que describe la dinámica del operador densidad que representa una mezcla estadística, es la ecuación de Liouville-Von Neumann. Supongamos a $t = 0$ una dada mezcla representada por

$$\rho(0) = \sum_n W_n |\psi_n(0)\rangle \langle \psi_n(0)|. \quad (4.13)$$

Cada estado de la mezcla evoluciona temporalmente de acuerdo con la ecuación de Schrödinger, es decir $|\psi_n(t)\rangle = U(t)|\psi_n(0)\rangle$, donde $U(t)$ es el operador de

evolución temporal. Dado el carácter unitario de este operador, se puede probar de forma directa que se satisface la ecuación de Liouville-Von Neumann

$$U(t)\rho(0)U^\dagger(t) = \rho(t) \quad (4.14)$$

o, equivalentemente

$$i\hbar\dot{\rho}(t) = [H(t), \rho(t)] \quad (4.15)$$

donde $H(t)$ es el Hamiltoniano del sistema cerrado, que puede depender eventualmente del tiempo. Podemos ver en la Ec. (4.14) que la dinámica de un sistema cerrado es unitaria. Notemos que para obtener la ecuación anterior hemos considerado la evolución temporal de los estados que componen la mezcla estadística, sin variar la composición estadística de la mezcla. Es decir hemos considerado que el sistema es cerrado.

4.3 No-separabilidad. Entrelazamiento. Decoherencia

4.3.1 Matriz densidad reducida

La ecuación de Liouville-Von Neumann recién deducida es válida para describir la evolución temporal de una mezcla estadística correspondiente a un sistema cerrado, que puede incluir las interacciones del sistema mismo y la influencia externa conocida y controlable de campos *clásicos*. Entonces, el Hamiltoniano puede ser de la forma $H(t) = H + V(t)$, donde el segundo término representa la influencia externa sobre el sistema, es decir la interacción del sistema observado con el exterior. $V(t)$ solamente tiene dependencia en operadores del sistema observado y eventual dependencia temporal debido a campos externos. Un ejemplo es la interacción de un sistema de espines con un campo magnético variable con el tiempo. La dependencia temporal de los valores de expectación de los observables se calcula con la solución de la ecuación de Liouville-Von Neumann (Ec. 4.15). Es decir, en este enfoque se excluye la posible interacción del sistema observado con otro sistema cuántico, como veremos enseguida.

Sin embargo, ahora estamos interesados en la evolución temporal de la matriz densidad que debemos asociar a un 'subsistema' cuántico S acoplado con otro sistema B, también de carácter cuántico. S es el sistema observado y controlado, mientras B es un sistema no observado ¹². En primer término analicemos

¹²Un ejemplo de esta situación lo encontramos en la interacción de la radiación con la materia. En el tratamiento usual, la radiación electromagnética es descripta mediante un campo clásico. De esa forma se derivan las probabilidades de transición dipolares de emisión y absorción estimuladas. Pero, para describir la radiación espontánea es necesario considerar el campo electromagnético cuantizado

4.3. NO-SEPARABILIDAD. ENTRELAZAMIENTO. DECOHERENCIA

de manera general, la idea de la separabilidad de un estado cuántico de un sistema bipartito puro. En la siguiente subsección retomaremos esta discusión en términos de la definición del concepto de entrelazamiento.

Consideremos que inicialmente los sistemas S y B se encuentran separados sin interacción entre ellos. Luego son puestos juntos y se les permite interactuar. Nos preguntamos acerca del estado final del sistema cuando ambos subsistemas son nuevamente separados y cesaron de interactuar. Más adelante analizaremos con detalle el scattering de dos partículas con espín 1/2.

Asociemos a cada espacio de Hilbert correspondientes a los grados de libertad de S y B las bases ortogonales correspondientes, $\{|s_i\rangle\}$ y $\{|b_j\rangle\}$. Los índices i y j representan los números cuánticos necesarios para especificar completamente cada sistema. Si inicialmente, a tiempo cero, cada sistema se encontraba en los estados puros $|S\rangle$ y $|B\rangle$, entonces el sistema combinado se encontraba en el estado producto directo $|\Psi\rangle_{ini} = |S\rangle \otimes |B\rangle$. Debido a la interacción entre ambos sistemas, el estado combinado inicial evolucionará hacia un estado combinado final a un tiempo t , $|\Psi\rangle_{ini} \rightarrow |\Psi(t)\rangle_{fin}$ cuando ya la interacción entre ambos sistemas se puede considerar despreciable

$$|\Psi\rangle_{fin} = U(t)|\Psi\rangle_{ini}, \quad (4.16)$$

donde $U(t)$ es el operador de evolución temporal, que gobierna la dinámica del sistema compuesto de acuerdo con las interacciones existentes entre las partes. En los casos generales, la dependencia del estado final con ambas variables no será de la forma de un simple producto. Para analizar esta idea, expandamos $|\Psi(t)\rangle_{fin}$ en la base producto del espacio de Hilbert completo,

$$|\Psi(t)\rangle_{fin} = \sum_{i,j} a_{i,j}(S, B, t) |s_i\rangle \otimes |b_j\rangle. \quad (4.17)$$

Los coeficientes $a_{i,j}(S, B, t)$ son las amplitudes de probabilidad de encontrar al sistema en el estado producto $|s_i\rangle \otimes |b_j\rangle$ luego de la interacción, para lo cual ocurren las transiciones $|S\rangle \rightarrow |s_i\rangle$ y $|B\rangle \rightarrow |b_j\rangle$. En general, la Ec.(4.17) contiene más de un término, por lo que $|\Psi(t)\rangle_{fin}$ no tiene la forma de un producto directo $|S'\rangle \otimes |B'\rangle$. Una forma factorizada indicaría la ausencia de cualquier grado de correlación entre ambos subsistemas, que necesariamente debe existir debido a la interacción.

Como ilustración de este punto, supongamos que los subsistemas nunca interactuaron, por lo cual el operador de evolución podría ser de la forma

$$U(t) = e^{-i\frac{t}{\hbar}(H_S+H_B)} = e^{-i\frac{t}{\hbar}H_S} e^{-i\frac{t}{\hbar}H_B}, \quad (4.18)$$

ya que $[H_S, H_B] = 0$. De acuerdo con ésto, el estado final es de la forma

$$|S(t)\rangle \otimes |B(t)\rangle,$$

con $|S(t)\rangle = e^{-i\frac{t}{\hbar}H_S}|S\rangle$ y $|B(t)\rangle = e^{-i\frac{t}{\hbar}H_B}|B\rangle$.

Comparando con Ec.(4.17), vemos que las amplitudes de probabilidad deben también estar factorizadas, en cuyo caso el resultado es de la forma

$$|\Psi(t)\rangle_{fin} = \sum_i a_i(S, t)|s_i\rangle \otimes \sum_j a_j(B, t)|b_j\rangle. \quad (4.19)$$

Es decir, en ausencia de interacción, cada sistema evoluciona independientemente, y las amplitudes de probabilidad tienen la forma de productos de amplitudes de probabilidades individuales de cada sistema por separado. *En general, el Hamiltoniano del sistema completo contiene términos de interacción, por lo que el operador de evolución no puede ser factorizado*¹³. De acuerdo con esto, la dinámica de cada sub-parte del sistema compuesto no puede ser descrita por un vector de estado dependiente de sus propias variables.

Resumiendo, si dos sistemas han interactuado en el pasado, las amplitudes de probabilidad conjunta son correlacionadas y no pueden ser factorizadas. Como consecuencia de la interacción correlacionada, no es posible en general asignar un único vector de estado a cada subsistema. Este último enunciado, se conoce como *principio de no separabilidad*. Veremos enseguida que el concepto de operador densidad brindará la forma de describir la evolución de un sub-sistema al que no puede asignársele un vector de estado debido a la correlación que surge por la interacción con otra parte de un sistema compuesto. Es aquí donde la introducción del concepto de matriz densidad cobra una motivación de carácter esencialmente cuántico, como una definición necesaria para poder describir un subsistema observado que interactúa con otro sistema cuántico no observado.

Analicemos ahora el importante asunto de calcular el valor de expectación de un observable que pertenece exclusivamente al sistema S, que como antes interactúa cuánticamente con el sistema B, que no es observado. Dado que la traza de un operador es invariante ante la base elegida para el cálculo, por conveniencia usaremos la base producto $\{|s_i\rangle \otimes |b_j\rangle\}$. Los elementos de la matriz densidad que describe al sistema completo son

$$\langle s_{i'} b_{j'} | \rho(t) | s_i b_j \rangle$$

¹³Como veremos en la discusión de la decoherencia cuántica, el Hamiltoniano total puede ser escrito como una suma, $H = H_S + H_B + H_{SB}$, donde generalmente $[H_{SB}, H_B] \neq 0$ y $[H_{SB}, H_S] \neq 0$.

4.3. NO-SEPARABILIDAD. ENTRELAZAMIENTO. DECOHERENCIA

en donde $\rho(t)$ representa el estado del sistema completo a tiempo t . A su vez, los elementos de matriz de un operador de la forma $\mathcal{Q} = Q(S) \otimes \mathbf{1}_{(B)}$ (que actúa solamente sobre el espacio de Hilbert de S), resultan de la forma

$$\langle s_{i'} b_{j'} | \mathcal{Q} | s_i b_j \rangle = \langle s_{i'} | Q(S) | s_i \rangle \delta_{jj'} \quad (4.20)$$

El valor de expectación de $\mathcal{Q}(S, B, t)$ en este estado es

$$\langle \mathcal{Q} \rangle = \text{Tr}(\rho(t) \mathcal{Q}). \quad (4.21)$$

Es fácil demostrar que el valor de expectación de la ecuación anterior resulta

$$\langle \mathcal{Q} \rangle = \text{Tr}_S(\rho_S Q(S)) \quad (4.22)$$

donde la traza se toma sobre las variables observadas, y hemos definido la *matriz densidad reducida*

$$\rho_S \equiv \text{Tr}_B(\rho), \quad (4.23)$$

es decir, en elementos de matriz,

$$\langle s_{i'} | \rho_S | s_i \rangle = \sum_j \langle s_{i'} b_j | \rho | s_i b_j \rangle. \quad (4.24)$$

Entonces, toda la información sobre la dinámica de los observables del sistema observado está contenida en la matriz densidad reducida. Es posible verificar que ρ_S es un operador densidad, ya que satisface: (a) Hermiticidad, (b) traza unitaria y (c) positividad, es decir que para cualquier estado del sistema de interés, $|S\rangle$, se cumple $\langle S | \rho_S | S \rangle \geq 0$ ¹⁴.

Este operador satisface una ecuación dinámica que no es la misma que la de un sistema cerrado, tal como la expresamos en las Eqs.(4.14) y (4.15). En efecto, usando las Eqs.(4.14) y (4.23), verificamos:

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_B U(t) \rho(0) U^\dagger(t) \quad (4.25)$$

o, equivalentemente

$$i\hbar \frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} = \text{Tr}_B [H(t), \rho(t)], \quad (4.26)$$

donde el Hamiltoniano $H(t)$ actúa sobre el espacio de Hilbert completo. A pesar de la similitud aparente con la ecuación de Liouville-Von Neumann para sistemas cerrados, la ecuación para la matriz densidad reducida es esencialmente diferente, ya que la presencia de la traza sobre las variables no observadas tiene consecuencias muy importantes sobre la dinámica del sistema observado, como discutiremos más adelante. Desde un punto de vista fundamental, la ecuación (4.26) admite la posibilidad de que la evolución del sistema observado deje de ser unitaria, y por lo tanto reversible.

¹⁴Consultar J. Preskill, *Lecture Notes for Physics: Quantum Information and Computation*, Cap 3.

4.3.2 Decoherencia

Como ejemplo de la evolución de un sistema cuántico abierto, analicemos el caso de un sistema (S) acoplado con un ambiente o baño (B) a través de una interacción (SB). La idea es analizar las consecuencias de la no-separabilidad sobre la dinámica de un sistema observado. Consideraremos que el baño se encuentra en equilibrio térmico a temperatura T . El Hamiltoniano total es de la forma

$$H = H_S + H_B + H_{SB} , \quad (4.27)$$

y consideremos el límite ‘adiabático’, es decir asumimos que $[H_S, H_{SB}] = 0$. Debido a esta hipótesis, se cumple $[H_S, H] = 0$ (dado que por definición $[H_S, H_B] = 0$), por lo que la evolución transcurrirá sin variación de la energía del sistema S . Por otro lado, en general $[H_{SB}, H_B] \neq 0$. Este es un caso de evolución de un sistema cuántico abierto en ausencia de disipación de energía, y es representativo de aquellas situaciones físicas donde el proceso de equilibración termodinámica de un sistema con un baño térmico es muy lento. A pesar de ello, la interacción sistema-ambiente puede generar procesos muy efectivos capaces de destruir la coherencia de un estado cuántico inicial en un tiempo muy corto. Este proceso recibe el nombre de decoherencia adiabática.

Para describir la interacción entre ambos sistemas proponemos un Hamiltoniano de la forma ¹⁵.

$$H_{SB} = \Lambda \otimes P , \quad (4.28)$$

es decir un producto de operadores Hermitianos: Λ que actúa sobre el espacio de Hilbert del sistema observado y P que opera en el espacio de Hilbert del ambiente. La dinámica del sistema observado se describe con el operador reducido

$$\rho_S = \text{Tr}_B\{\rho\} . \quad (4.29)$$

Debido a la adiabaticidad, el operador de evolución temporal correspondiente al sistema completo $U(t) = e^{-iHt}$ puede ser factorizado en la forma siguiente

$$U(t) = e^{-iH_S t/\hbar} e^{-i(H_{SB}+H_B)t/\hbar} \equiv V_0(t)V(t) , \quad (4.30)$$

¹⁵Esta forma propuesta para el Hamiltoniano de interacción, elegida por simplicidad, puede ser generalizada. El razonamiento que sigue es también válido en otros casos, por ejemplo para un Hamiltoniano de la forma $H_{SB} = \sum_A \Lambda^A \otimes P^A$ que representa a un ensamble de particiones, tal como un conjunto de pares de espines, donde $\Lambda_A = 1_1 \otimes \dots \otimes \Lambda_A \otimes \dots \otimes 1_N$ actúa exclusivamente en el espacio de Hilbert del A -ésimo elemento, y donde $|m\rangle = |m_1\rangle \otimes \dots \otimes |m_A\rangle \otimes \dots \otimes |m_N\rangle$ es autovector de Λ^A .

4.3. NO-SEPARABILIDAD. ENTRELAZAMIENTO. DECOHERENCIA

donde hemos definido los operadores $V_0(t) \equiv e^{-iH_S t/\hbar}$, que actúa sobre variables del sistema solamente, y $V(t) \equiv e^{-i(H_{SB}+H_B)t/\hbar}$, que opera sobre ambos subespacios de Hilbert. Debido a que $[H_S, \Lambda] = 0$, existe una base $\{|m\rangle\}$ que diagonaliza simultáneamente a ambos Hamiltonianos:

$$H_S|m\rangle = E_m|m\rangle, \quad (4.31)$$

$$\Lambda|m\rangle = \lambda_m|m\rangle. \quad (4.32)$$

Definamos además un operador V_m tal que

$$V(t)|m\rangle = |m\rangle V_m(t), \quad (4.33)$$

entonces

$$V_m(t) = \exp\{-i(H_B + \lambda_m P)t/\hbar\} \quad (4.34)$$

es un operador unitario que actúa sobre el sistema B , y tiene la forma de $V(t)$, en donde se reemplaza el operador Λ por el autovalor correspondiente.

De esta manera, la dependencia temporal de un elemento del operador densidad reducido en la base $\{|m\rangle\}$ a tiempo t , a partir de un estado total inicial $\rho(0)$ es

$$\rho_{Smn}(t) = \langle m|\text{Tr}_B U(t) \rho(0) U^\dagger(t)|n\rangle. \quad (4.35)$$

Usualmente se asume que el estado inicial puede factorizarse, $\rho(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_B$, en cuyo caso la ecuación anterior se escribe en la forma

$$\rho_{Smn}(t) = \langle m|V_0(t)\rho_S(0)V_0^\dagger(t)|n\rangle \text{Tr}_B\{V_m(t)\rho_B V_n^\dagger(t)\}, \quad (4.36)$$

es decir

$$\rho_{Smn}(t) = \rho_S(0)_{mn} e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} \text{Tr}_B\{V_m(t)\rho_B V_n^\dagger(t)\}. \quad (4.37)$$

En (4.36) vemos que $\rho_{Smn}(t)$ tiene la forma de un producto del elemento de matriz correspondiente a la evolución unitaria cerrada del estado inicial del sistema S , multiplicado por una función del tiempo que suele denominarse 'función de decoherencia',

$$G_{mn}(t) \equiv \text{Tr}_B\{V_m(t)\rho_B V_n^\dagger(t)\}. \quad (4.38)$$

Esta función toma su valor máximo en $t = 0$ y decae para $t > 0$ por efectos de interferencia, con una 'tasa de decoherencia' que depende en última instancia

de las propiedades del ambiente y del acople sistema-ambiente a través de sus Hamiltonianos y sus propiedades de conmutación.

El valor de expectación de un observable \mathcal{O} del sistema S es de la forma

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Tr}_S \{ \rho_S(t) \mathcal{O} \} = \sum_{mn} \rho_{Smn}(t) \mathcal{O}_{nm} , \quad (4.39)$$

es decir

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{mn} \rho_S(0)_{mn} e^{i(E_n - E_m)t} \mathcal{O}_{nm} G_{mn}(t) . \quad (4.40)$$

Un ejemplo de cálculo de la función de decoherencia muy conocido en la literatura es el del modelo espín-bosón¹⁶, correspondiente a un sistema de dos niveles interactuante con un gran reservorio de bosones. La forma general de Hamiltoniano correspondiente a esta clase de modelos es¹⁷

$$H = H_S + \sum_k \omega_k b_k^\dagger b_k + \Lambda_S \sum_k (g_k^* b_k + g_k b_k^\dagger) , \quad (4.41)$$

donde los coeficientes g_k caracterizan la interacción del sistema con el baño de bosones, y el término de interacción tiene la forma de (4.28), y representa un acople lineal del sistema con el baño de bosones. Aquí H_S no está fijado, solamente se impone la conmutación $[H_S, \Lambda] = 0$ ¹⁸.

Como resultado del modelo se obtiene la función de decoherencia G_{mn}

$$G_{mn} = \prod_k S_{mn,k} , \quad (4.42)$$

con

$$S_{mn,k} = e^{(-\omega_k^{-2} |g_k|^2 P_{mn,k})} \quad (4.43)$$

y

$$P_{mn,k} = 2(\lambda_m - \lambda_n)^2 \sin^2 \frac{\omega_k t}{2} \coth \frac{\beta \omega_k}{2} + i(\lambda_m^2 - \lambda_n^2)(\sin \omega_k - \omega_k t) , \quad (4.44)$$

¹⁶Ver por ejemplo: H.P. Breuer and F.Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press (2002), Capítulo 4. G.M. Palma, K.A. Suominen and A.K. Ekert, Proc. R. Soc. Lond., A452, 567-584 (1996). J. Luczka, Physica A 167, 919 (1990). D. Mozyrsky and V. Privman, J. Stat. Phys. 91, 787 (1998). R. Alicki, Open Sys & Information Dyn. 11, 53 (2004) .

¹⁷D.Mozyrsky and V. Privman, J. Stat. Phys. 91, 787 (1998).

¹⁸Dentro de esta clase de modelos, uno muy usado en el contexto de decoherencia en sistemas cuánticos es el caso de $H_S \propto \sigma_z$ y $\Lambda \propto \sigma_x$. Este modelo representa el caso de un qubit en presencia de un baño de bosones.

4.3. NO-SEPARABILIDAD. ENTRELAZAMIENTO. DECOHERENCIA

con $\beta = 1/K_B T$. Finalmente, un elemento típico de la matriz densidad puede ser escrito en la forma:

$$\rho_{S_{mn}}(t) = \rho_S(0)_{mn} e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} e^{-(\lambda_m - \lambda_n)^2 \Gamma(t)} e^{-i(\lambda_m^2 - \lambda_n^2) \Upsilon(t)}, \quad (4.45)$$

donde hemos definido las funciones

$$\Gamma(t) = 8 \sum_k \omega_k^{-2} |g_k|^2 \sin^2 \frac{\omega_k t}{2} \coth \frac{\beta \omega_k}{2} \quad (4.46)$$

y

$$\Upsilon(t) = \sum_k \frac{|g_k|^2}{\omega_k^2} \sin(\omega_k - \omega_k t). \quad (4.47)$$

Vemos de las expresiones anteriores que el módulo del elemento de la matriz densidad decae con una *tasa de decoherencia* igual a $(\lambda_m - \lambda_n)^2 \Gamma(t)$. Para obtener una estimación de esta tasa se debe realizar la suma sobre k en (4.46) tomando el límite del continuo, introduciendo una densidad de estados bosónicos y asumiendo una dependencia para los coeficientes $g_k(\omega)$. Esto equivale a asumir un modelo sobre la naturaleza del ambiente¹⁹. Como ilustración, veamos un modelo unidimensional, para temperatura no nula. Al pasar al continuo es conveniente definir la *densidad espectral* $J(\omega)$

$$J(\omega) = 4f(\omega)|g(\omega)|^2, \quad (4.48)$$

donde $f(\omega)$ es la densidad de estado de los bosones. Como un posible modelo para el ambiente, se asume para la densidad espectral una dependencia lineal con la frecuencia, con una frecuencia de corte Ω ,

$$J(\omega) = A\omega e^{-\omega/\Omega}. \quad (4.49)$$

Si se asumen temperaturas bajas, tales que $K_B T \ll \Omega$, finalmente se obtiene para $\Gamma(t)$ la siguiente expresión (a menos de una constante multiplicativa):

$$\Gamma(t) = -\frac{1}{2} \ln(1 + \Omega^2 t^2) - \ln \left[\frac{\sinh(t/\tau_B)}{t/\tau_B} \right], \quad (4.50)$$

donde $\tau_B^{-1} \equiv \pi K_B T/\hbar$. Vemos que la función $\Gamma(t)$ es una suma de dos contribuciones, de naturaleza diferente

$$\Gamma(t) = \Gamma_{vac}(t) + \Gamma_T(t). \quad (4.51)$$

¹⁹Ver por ejemplo J. Luczka, Physica A 167, 919 (1990).

El primer término es independiente de la temperatura, y suele denominarse contribución del vacío (ausencia de bosones) . El segundo término es la contribución térmica (depende de T), y se anula en el límite $T \rightarrow 0$ (contribución térmica).

En (4.50) se pueden apreciar tres regímenes temporales en el crecimiento de $\Gamma(t)$ cuando t crece ²⁰:

- (a) $\Gamma(t) \approx -\frac{1}{2}\Omega^2 t^2$, para $t \ll \Omega^{-1}$ (régimen calmo),
- (b) $\Gamma(t) \approx -\ln \Omega t$, para $\Omega^{-1} \ll t \ll \tau_B$ (régimen del vacío) y
- (c) $\Gamma(t) \approx -\frac{t}{\tau_B}$, para $\tau_B \ll t$ (régimen térmico).

Durante el régimen del vacío, la decoherencia es controlada principalmente por las fluctuaciones del vacío del campo. El régimen térmico es conocido también como Markoviano.

Una propiedad importante de la decoherencia adiabática es la existencia de elementos de la matriz densidad que permanecen inalterados por la decoherencia. Tal como se infiere de (4.36) para un Hamiltoniano de interacción de la forma (4.28) con un dado Λ (y que se verifica explícitamente en el caso particular correspondiente a las ecuaciones (4.42)-(4.44)), aquellos elementos para los cuales $\lambda_m = \lambda_n$ tienen $G_{mn} = 1$. Es decir, todos los elementos pertenecientes a la diagonal en bloques de la matriz densidad en la base de H_{SB} no son afectados por la decoherencia. El módulo de los restantes elementos de la matriz densidad (coherencia) decae por efectos de la decoherencia, con tasas proporcionales a $\Gamma(t)$ y moduladas por el cuadrado de la diferencia de los autovalores de H_{SB} correspondientes.

En resumen, esta breve presentación sobre el proceso de decoherencia cuántica, basada en un modelo simple soluble, permite concluir que la dinámica de un sistema cuántico abierto contiene los elementos necesarios para la existencia de una evolución irreversible, con pérdida de coherencia, aún en procesos en los que no existe disipación de energía en el sistema observado.

4.3.3 Entrelazamiento y correlaciones cuánticas en sistemas bipartitos puros.

En esta sección definiremos los conceptos de *entrelazamiento* y *correlación* cuánticos. Estas definiciones serán de utilidad para formalizar el estudio de los efectos del principio de no-separabilidad en la discusión del argumento

²⁰H.P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press (2002), Cap. 4.

4.3. NO-SEPARABILIDAD. ENTRELAZAMIENTO. DECOHERENCIA

de EPR. El análisis será desarrollado en sistemas *bipartitos puros*, es decir que supondremos un sistema global, que está compuesto por dos subsistemas, y al que asignaremos un vector de estado. Este caso brinda la posibilidad de desarrollar las ideas de entrelazamiento de manera formal, y la discusión puede ser extendida para otros problemas como el modelo de Jaynes-Cummings sobre la interacción de la radiación con la materia, o casos más generales de sistemas observados acoplados con ambientes cuánticos no controlados²¹.

Tanto en mecánica clásica como en mecánica cuántica, se puede definir un estado puro como un estado que está tan completamente especificado como la teoría lo permite. En mecánica clásica, un estado puro está representado por un punto en el espacio de las fases. En mecánica cuántica, se trata de un vector en un espacio vectorial complejo. Posiblemente, la característica más notable de la mecánica cuántica, que la distingue de la mecánica clásica, sea el hecho de que para cualquier sistema compuesto existen estados puros globales, en los que las partes del sistema no se encuentran en estados puros. Dichos estados del sistema global se denominan *estados entrelazados*²².

Consideremos un estado puro de un sistema bipartito compuesto S^{AB} , con espacio de Hilbert $\mathcal{H}^{AB} = \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$, con $\dim \mathcal{H}^A = a$ y $\dim \mathcal{H}^B = b$. Los operadores densidad reducidos de ambos subsistemas S^A y S^B se denotan por $\rho^A \equiv \text{Tr}_B \rho^{AB}$ y $\rho^B \equiv \text{Tr}_A \rho^{AB}$, donde $\rho^{AB} = |\Psi^{AB}\rangle\langle\Psi^{AB}|$ es el operador densidad del sistema global. Se pueden demostrar las siguientes afirmaciones (ejercicio)²³:

1. Un estado puro de un sistema bipartito $|\Psi^{AB}\rangle$ es un estado producto si y sólo si cualquiera de las dos matrices densidad reducidas es pura. En tal caso la otra también lo es.
2. *Descomposición de Schmidt*: existe una base $\{|u_i\rangle\}$ en \mathcal{H}^A y una base $\{|v_j\rangle\}$ en \mathcal{H}^B , tales que

$$|\Psi^{AB}\rangle = \sum_i g_i |u_i\rangle \otimes |v_i\rangle, \quad (4.52)$$

es decir que el estado del sistema global puede ser expresado como combinación con un único índice i , de estados producto de dos bases ortonormales. En términos del operador densidad, el resultado anterior se expresa

$$\rho^{AB} = \sum_i \sum_k g_i g_k^* |u_i\rangle\langle u_k| \otimes |v_i\rangle\langle v_k|, \quad (4.53)$$

²¹Resulta ilustrativo el trabajo de A. Ekert y P.L. Knight, Am. J. Phys. 63, 415 (1995)

²²W.K. Wootters, Quantum Information and Computation, Vol. 1, 27 (2001)

²³Para la prueba de estas afirmaciones consultar A. Ekert y P.L. Knight, Am. J. Phys. 63, 415 (1995). J. Preskill, Lecture Notes for Physics 229:Quantum Information and Computation.

con $\sum_i |g_i|^2 = 1$. Notemos que las bases usadas en la descomposición dependen del estado particular $|\Psi^{AB}\rangle$.

3. Un estado puro de un sistema bipartito $|\Psi^{AB}\rangle$ es no-entrelazado si y sólo si el rango de su descomposición de Schmidt es igual a 1 (es decir hay un único término en la suma de la ecuación (4.53)). Equivalentemente, diremos que un sistema compuesto es entrelazado si y sólo si el rango de la descomposición es mayor que 1.
4. Las matrices reducidas ρ_A y ρ_B , tienen los mismos autovalores no nulos, aún cuando los sub-sistemas tengan dimensiones diferentes. Así, el número de autovalores nulos puede ser diferente en ambos subsistemas.

Entonces, de acuerdo a estos resultados, podemos definir que un estado puro de un sistema bipartito es *entrelazado* si no puede expresarse como un producto de estados puros de los sistemas individuales. Si el sistema global se encuentra en un estado entrelazado, sus subsistemas no tienen estados puros suyos propios. Las partes que conforman un sistema compuesto, no pueden estar en un estado de máximo conocimiento cuando el estado global es entrelazado. Esta importante propiedad se ilustra en el ejemplo que discutimos a continuación.

4.4 Dispersión de haces de partículas con espín 1/2.

El estudio de este ejemplo simple es de gran utilidad para ganar intuición sobre el principio de no-separabilidad y las definiciones de entrelazamiento y correlaciones cuánticas. Es un caso de tratamiento matemático simple, y a la vez contiene los ingredientes básicos para ilustrar la dinámica de sistemas cuánticos bipartitos puros. Estas ideas nos servirán para reconsiderar el argumento de EPR.

Consideremos dos haces de partículas con espín 1/2, que interactúan en un experimento de colisiones elásticas. Supondremos que las energías y los ángulos de scattering se mantienen fijos, y nos concentramos en las variables de espín de los vectores de estado. Asumimos, por simplicidad, que inicialmente los dos haces están completamente polarizados en sentidos opuestos a lo largo de una dada dirección de cuantización (que denotamos z). Bajo la condición de que ambos haces fueron preparados independientemente, el estado inicial conjunto de espín está dado por

$$|\psi\rangle_{ini} = |+\rangle|-\rangle = |+-\rangle \quad (4.54)$$

Convenimos en que el primer lugar en la escritura de los vectores de estado corresponde siempre al haz 1. Una situación como la presentada puede corresponder, por ejemplo, a la dispersión de haces de electrones libres y átomos

4.4. DISPERSIÓN DE HACES DE PARTÍCULAS CON ESPÍN 1/2.

de hidrógeno. En experimentos de baja energía todas las fuerzas dependientes del espín pueden descartarse en buena aproximación, por lo que puede asumirse que la componente de espín total en la dirección de cuantización (digamos z) se conserva durante la colisión.

Las partículas serán observadas luego de la dispersión, cuando se encuentran separadas de manera que cesaron de interactuar entre ellas. El estado final lo denotaremos por el vector de estado $|\psi\rangle$, que puede ser expresado en términos de un conjunto de estados base, elegidos convenientemente

$$|\psi\rangle_{ini} \rightarrow |\psi\rangle = f|+-\rangle + g|-+\rangle, \quad (4.55)$$

donde las amplitudes complejas f y g dependen de la dinámica de la dispersión. Los signos \pm indican spin-up y spin-down respectivamente, a lo largo de z . La conservación de la componente del espín total hace que en la expresión anterior no aparezcan otros términos adicionales. La normalización del estado final impone la condición

$$|f|^2 + |g|^2 = 1 \quad (4.56)$$

Como discutimos anteriormente, en general no es posible expresar el estado final como producto de estados individuales de cada partícula. *En términos de las definiciones dadas más arriba, podemos decir que el estado final es no-separable o entrelazado.*

4.4.1 Matriz densidad de dos partículas y matrices densidad reducidas.

Una representación explícita de la matriz densidad de dos partículas puede hacerse en la base producto directo $\{|Mm\rangle\}$ con $M = \pm 1/2, m = \pm 1/2$, en la dirección z :

$$\rho = \begin{pmatrix} \langle ++|\rho|++\rangle & \langle ++|\rho|+-\rangle & \langle ++|\rho|-+\rangle & \langle ++|\rho|--\rangle \\ \langle +-|\rho|++\rangle & \langle +-|\rho|+-\rangle & \langle +-|\rho|-+\rangle & \langle +-|\rho|--\rangle \\ \langle -+|\rho|++\rangle & \langle -+|\rho|+-\rangle & \langle -+|\rho|-+\rangle & \langle -+|\rho|--\rangle \\ \langle --|\rho|++\rangle & \langle --|\rho|+-\rangle & \langle --|\rho|-+\rangle & \langle --|\rho|--\rangle \end{pmatrix}. \quad (4.57)$$

Es directo verificar que el operador densidad $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ correspondiente al estado final, tiene la representación matricial

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & |f|^2 & fg^* & 0 \\ 0 & gf^* & |g|^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.58)$$

Los elementos diagonales tienen el significado de probabilidad: $|f|^2$ es la probabilidad de que la partícula del primer haz sea hallada con “espín paralelo” (up) y la del segundo haz “espín antiparalelo” (down). De manera análoga se interpreta $|g|^2$. Los elementos no diagonales representan la *coherencia*. Toda la información sobre las propiedades asociadas con el espín del sistema combinado de dos partículas se encuentra en la función de onda de Ec.(4.55) o la matriz densidad de Ec.(4.58).

De acuerdo con nuestra discusión previa, el estado final de las dos partículas luego de la interacción es entrelazado o no factorizable, por lo que no es posible asociar un vector de estado a cada partícula. Para avanzar en la descripción de una situación como ésta, debe utilizarse necesariamente la *matriz densidad reducida* que definimos anteriormente. Si denotamos por M y m a las componentes de espín de los subsistemas observado y no-observado, respectivamente, obtenemos los elementos de la matriz densidad reducida del sistema observado calculando la traza

$$\langle M' | \rho_1 | M \rangle = \sum_m \langle M' m | \rho | M m \rangle. \quad (4.59)$$

Así, verificamos fácilmente que

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} |f|^2 & 0 \\ 0 & |g|^2 \end{pmatrix}. \quad (4.60)$$

Análogamente, la matriz densidad reducida para el “sistema no observado” es

$$\rho_2 = \begin{pmatrix} |g|^2 & 0 \\ 0 & |f|^2 \end{pmatrix}. \quad (4.61)$$

La matriz densidad de un espín 1/2 puede ser expresada en términos de las componentes del vector de polarización. Para cualquiera de las dos partículas podemos escribir su matriz densidad reducida en la forma general

$$\rho_{1,2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z^{(1,2)} & P_x^{(1,2)} - iP_y^{(1,2)} \\ P_x^{(1,2)} + iP_y^{(1,2)} & 1 + P_z^{(1,2)} \end{pmatrix}, \quad (4.62)$$

donde las componentes del vector de polarización se definen $P_i \equiv \text{Tr}\{\rho_1 \sigma_i\}$, con σ_i ($i = x, y, z$) los operadores de Pauli. Comparando con (4.61) encontramos que

$$P_z^{(1)} = |f|^2 - |g|^2 = -P_z^{(2)}; \quad P_x^{(1)} = P_y^{(1)} = 0; \quad P_x^{(2)} = P_y^{(2)} = 0. \quad (4.63)$$

Las matrices reducidas contienen toda la información de cada subsistema a la que es posible acceder. Sin embargo, el estado combinado original $|\psi\rangle$ no puede

4.4. DISPERSIÓN DE HACES DE PARTÍCULAS CON ESPÍN 1/2.

ser reconstruído a partir de ellas. Eso se advierte inmediatamente, ya que ρ_1 y ρ_2 describen mezclas estadísticas de cada subsistema, que no contienen la coherencia que caracteriza al estado puro del sistema completo, evidenciado por la Ec.(4.55). La información de la fase relativa de f y g ya no está en las matrices reducidas, las que solamente contienen los módulos de estas cantidades complejas.

Como adelantamos al comienzo de la Sección 4.2, en el caso de sistemas bipartitos en estados puros es sencillo determinar si el vector de estado es factorizable. La información necesaria se encuentra en las matrices reducidas de los subsistemas, y el criterio relevante surge del hecho de que un estado puro debe satisfacer $\text{Tr}(\rho^2) = (\text{Tr}\rho)^2 = 1$. Si ρ_1 ó ρ_2 satisface esa relación, entonces el subsistema correspondiente está en un estado puro, y el estado total se factoriza, lo que implica que el sistema no está entrelazado. Es fácil comprobar que para un sistema bipartito en estado puro se tiene $(\text{Tr}\rho_1^2) = 1$ si y sólo si $(\text{Tr}\rho_2^2) = 1$.

Para el caso de espín 1/2, el criterio de entrelazamiento se puede enunciar mediante el vector de polarización del haz. El haz se encuentra en un estado puro si y sólo si $|\mathbf{P}| = 1$. Recordemos que en general $0 \leq |\mathbf{P}| \leq 1$. Entonces, los dos subsistemas están en estado puro si sus correspondientes vectores de polarización tienen módulo unidad. Como deducimos inmediatamente de las relaciones (4.63), esta condición es violada por los vectores \mathbf{P}^1 y \mathbf{P}^2 . El estado de los dos subsistemas no puede representarse por un vector de estado, implicando que el estado $|\psi\rangle$ es entrelazado.

De acuerdo con las consideraciones hechas en la Sección 4.3, si medimos las propiedades de uno de los subsistemas sin observar al otro, toda la información disponible está en la matriz densidad reducida. Tal como acabamos de ver, la descripción del estado del sistema observado, por ejemplo a través de ρ_1 , ya no contiene información (en general contiene menos información) sobre la correlación cuántica existente en el sistema completo.

4.4.2 Parámetros de correlación. Discusión física

Para el caso de un espín vimos que la matriz densidad puede ser caracterizada completamente a través del vector de polarización. O sea que se puede describir de manera completa el estado cuántico en términos de las tres componentes de este vector. Para el caso de dos espines, la situación es más compleja. Sin embargo, también se puede parametrizar un estado arbitrario del sistema, expresando su operador densidad en términos de los vectores de polarización y de las componentes de un tensor de segundo orden, denominado tensor de correlaciones. En efecto, es posible verificar que cualquier ρ en el espacio de

Hilbert de dos espines (matrices 4×4) se puede escribir de la siguiente manera:

$$\rho = \frac{1}{4} \left\{ \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + \sum_i P_i^{(1)}(\sigma_i \otimes \mathbf{1}) + \sum_j P_j^{(2)}(\mathbf{1} \otimes \sigma_j) + \sum_{i,j} C_{(i,j)}^{(1,2)}(\sigma_i \otimes \sigma_j) \right\} \quad (4.64)$$

donde hemos definido el *tensor de correlaciones*

$$C_{(i,j)}^{(1,2)} \equiv \text{Tr}\{\rho(\sigma_i \otimes \sigma_j)\} = \langle \sigma_i \otimes \sigma_j \rangle \quad (4.65)$$

con σ_i, σ_j las matrices de Pauli, para $i, j = x, y, z$. Esta expresión representa una parametrización de la matriz densidad en el espacio de Hilbert de dos espines $\frac{1}{2}$, en términos de 15 parámetros²⁴. Entonces, determinando experimentalmente las componentes de los vectores de polarización y del tensor de correlaciones, es posible caracterizar completamente el estado del sistema de dos espines.

Para analizar el significado físico de los parámetros de correlación, comencemos discutiendo el caso de un estado completamente no-correlacionado, representado entonces por una matriz densidad producto directo

$$\rho_{nc} = \rho_1 \otimes \rho_2. \quad (4.66)$$

Calculemos los elementos del tensor de correlación a partir de ρ_{nc} . Usando propiedades de la traza de productos directos, es sencillo demostrar que en este caso se cumple

$$C_{(i,j)}^{(1,2)} = \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = P_i^{(1)} P_j^{(2)} \quad (4.67)$$

Es decir, en ausencia de correlación, $C_{(i,j)}^{(1,2)}$ se reduce simplemente al producto de las componentes de los vectores de polarización individuales.

Consideremos ahora dos haces de partículas de espín $1/2$ que han interactuado en el pasado, y que están caracterizados por un operador densidad conjunto ρ , y obtengamos una expresión explícita para la componente zz del tensor $C_{(i,j)}^{(1,2)}$. Más adelante generalizaremos este razonamiento para direcciones arbitrarias. Sean $|M\rangle$ $|m\rangle$ los estados base en el primero y segundo haces, respectivamente. Para el cálculo de la traza involucrada en la definición del tensor de correlaciones utilizaremos la base del espacio producto $|M\rangle \otimes |m\rangle$ (autobase de $|\sigma_z\rangle \otimes |\sigma_z\rangle$). Así, es directo obtener

$$C_{(z,z)}^{(1,2)} = \text{Tr}\{\rho(\sigma_z \otimes \sigma_z)\} = \sum_{Mm} \langle Mm | \rho | Mm \rangle \langle M | \sigma_z | M \rangle \langle m | \sigma_z | m \rangle. \quad (4.68)$$

²⁴La cantidad de parámetros reales necesarios para determinar completamente al operador densidad en un espacio de Hilbert de dimensión N es $N^2 - 1$, debido a la hermiticidad y a la normalización de ρ . En el caso de un espín $\frac{1}{2}$ son necesarios tres parámetros en general, por ejemplo las componentes del vector de polarización.

4.4. DISPERSIÓN DE HACES DE PARTÍCULAS CON ESPÍN 1/2.

La expresión anterior se puede interpretar sencillamente en términos de probabilidades de transición. Los elementos de matriz de las matrices de Pauli toman valores ± 1 , por lo que su producto también toma los mismos valores. El valor positivo del producto implica que el estado de ambas partículas es up o down. El valor negativo implica direcciones opuestas del espín en ambos haces. El coeficiente $C_{(z,z)}^{(1,2)}$ es la suma de estos valores, pesados por la correspondiente probabilidad de detección conjunta, definida como $W(zz)_{Mm} \equiv \langle Mm | \rho | Mm \rangle$, donde se indica que ambos instrumentos de medición están alineados a lo largo del eje z .²⁵

Evaluando los elementos de matriz de σ_z en (4.68), obtenemos para el coeficiente de correlación las siguientes expresiones:

$$C_{(z,z)}^{(1,2)} = W(zz)_{++} + W(zz)_{--} - W(zz)_{+-} - W(zz)_{-+}, \quad (4.69)$$

ó

$$C_{(z,z)}^{(1,2)} = \frac{1}{N} [N(zz)_{++} + N(zz)_{--} - N(zz)_{+-} - N(zz)_{-+}], \quad (4.70)$$

siendo $N(zz)_{++}$ el número de eventos de coincidencia donde una partícula en el primer haz se detectó "spin-up" en el primer detector, y simultáneamente su compañero en el segundo haz fue hallado en el mismo estado. De manera análoga se definen los otros términos. A su vez, N es el número total de mediciones, asumido grande (lo suficiente para asegurar la validez de la interpretación estadística).

En el caso general, cuando se orientan los dos analizadores a lo largo de dos direcciones arbitrarias \mathbf{a} , \mathbf{b} , denotamos $\sigma_a = \sigma \cdot \mathbf{a}$ y $\sigma_b = \sigma \cdot \mathbf{b}$ a las componentes del vector de Pauli en esas direcciones. Generalizamos la definición del coeficiente de correlación definiendo

$$C_{(a,b)}^{(1,2)} \equiv \text{Tr} \rho (\sigma_a \otimes \sigma_b) = \langle \sigma_a \otimes \sigma_b \rangle. \quad (4.71)$$

Repitiendo los pasos que llevaron a (4.69), se puede obtener

$$C_{(a,b)}^{(1,2)} = W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{++} + W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{--} - W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{+-} - W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{-+}. \quad (4.72)$$

Cada término $W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{Mm}$ denota la probabilidad de que una partícula del primer haz se halle con espín M respecto de \mathbf{a} , y simultáneamente su compañero de colisión del segundo haz se encuentre con espín m respecto de la dirección \mathbf{b} . La

²⁵Recordemos que la cantidad $W = \langle \psi | \rho | \psi \rangle$ es la probabilidad de encontrar al sistema en el estado ψ luego de una medición.

normalización de las probabilidades impone que $\sum_{M,m} W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{Mm} = 1$, lo que implica que

$$|C_{(a,b)}^{(1,2)}| \leq 1, \quad (4.73)$$

alcanzándose el límite superior cuando se cumple $W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{+-} = 0$ y $W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{-+} = 0$. En ese caso, se cumple entonces

$$C_{(a,b)}^{(1,2)} = W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{++} + W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{--} = 1. \quad (4.74)$$

Así, cuando el estado conjunto de los dos espines satisface esta condición, las únicas posibilidades son de máxima correlación, es decir cada vez que una partícula del primer haz se halla con espín up o down con respecto a la dirección \mathbf{a} , su par en el segundo haz será detectado en idéntico estado a lo largo de \mathbf{b} . Decimos que los resultados de las mediciones están perfectamente correlacionados. Similarmente, en el límite inferior de (4.73), $W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{++} = 0$ y $W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{--} = 0$, por lo que

$$C_{(a,b)}^{(1,2)} = -W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{+-} - W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{-+} = -1, \quad (4.75)$$

y decimos que existe perfecta anticorrelación: en este estado conjunto, las dos partículas correlacionadas siempre serán encontradas en estados de espín opuestos con respecto a las direcciones \mathbf{a} y \mathbf{b} . Finalmente, decimos que las dos mediciones son no-correlacionadas si $C_{(a,b)}^{(1,2)} = \langle \sigma_a \rangle \langle \sigma_b \rangle$.

Resulta útil obtener el tensor de correlaciones $C_{i,j}^{(1,2)} = \text{Tr} \rho(\sigma_i \otimes \sigma_j)$ para el estado caracterizado por $|\psi\rangle = f|+-\rangle + g|-+\rangle$. Es fácil verificar que $C_{zz}^{(1,2)} = -(|f|^2 + |g|^2) = -1$, es decir anticorrelación estricta, como era esperable de acuerdo a la forma de $|\psi\rangle$. Por otro lado, $C_{xx}^{(1,2)} = C_{yy}^{(1,2)} = 2|f||g|\cos \delta$ y $C_{xy}^{(1,2)} = -C_{yx}^{(1,2)} = -2|f||g|\sin \delta$, donde $f = |f|e^{i\alpha}$ y $g = |g|e^{i\beta}$, con $\delta = \alpha - \beta$. Los restantes elementos se anulan (se recomienda verificar este resultado a modo de ejercicio).

Podemos comprobar que cualquier tensor de correlación $C_{(a,b)}^{(1,2)}$ puede ser expandido en términos de los elementos del tensor $C_{i,j}$. Basta para ello expandir las matrices σ_a y σ_b en términos de σ_i , es decir $\sigma_a = \sum_i a_i \sigma_i$, $\sigma_b = \sum_j a_j \sigma_j$. Reemplazando en (4.71) se obtiene

$$C_{(a,b)}^{(1,2)} = \sum_{i,j} a_i b_j C_{i,j}^{(1,2)}. \quad (4.76)$$

Entonces, conociendo los coeficientes $C_{i,j}^{(1,2)}$ tenemos toda la información acerca de las propiedades de correlación. Notemos además que la terna $i = x, y, z$ es arbitraria.

4.4. DISPERSIÓN DE HACES DE PARTÍCULAS CON ESPÍN 1/2.

Finalmente, como ejemplo expresemos el coeficiente $C_{(a,b)}^{(1,2)}$ correspondiente al estado $|\psi\rangle$ dado en Ec. (4.55):

$$C_{(a,b)}^{(1,2)} = 2|f||g| \sin\beta \sin\beta' \cos(\alpha' - \alpha + \delta) - \cos\beta \cos\beta'. \quad (4.77)$$

En la expresión anterior, α, α' y β, β' son los ángulos azimutales y polares, respectivamente, de los versores \mathbf{a} y \mathbf{b} .

Como comentamos más arriba, el estado (4.55) es entrelazado cuando los coeficientes f y g son ambos distintos de cero. Analicemos la correlación asociada con mediciones a lo largo de z , luego generalizaremos la discusión para direcciones arbitrarias. Vimos que el vector de estado $|\psi\rangle$ en este caso predice una anticorrelación estricta entre los dos haces, lo que implica que si el primer observador encuentra a tiempo t_1 una partícula con espín up, entonces el segundo observador encontrará a un tiempo posterior t_2 a la otra partícula del par interactuante en un estado de espín down, con certeza. Analizando los resultados en cada detector separadamente, encontraremos una distribución de resultados de acuerdo con los coeficientes f y g . Estas distribuciones están correlacionadas, de acuerdo con la forma de las matrices reducidas ρ_1 y ρ_2 , que muestran que las probabilidades de cada estado se complementan. Pero lo novedoso es que debido al entrelazamiento, no es posible asignar un vector de estado a cada partícula antes de una medición. Los estados de cada partícula están *indeterminados*, más que desconocidos, previo a una medición. Solamente el estado conjunto $|\psi\rangle$ está perfectamente determinado. El hecho sorprendente es que, aunque la segunda partícula no tiene un estado definido antes de la medición de la primera, luego de esta medición, será encontrada con certeza en un estado definido. La medición de una de las dos partículas determina inmediatamente el estado de la otra y viceversa. Notemos que la anticorrelación perfecta asociada con (4.55) se cumple si los analizadores son alineados a lo largo de z . Para otras direcciones de alineamiento, la correlación se reduce ²⁶. A un estado global con estas características lo calificaremos como *estado máximamente entrelazado*. Es decir, un estado tal que existe una dirección de detección tal que la correlación es máxima.

Resulta ilustrativo comparar el estado puro $|\psi\rangle$ con una mezcla estadística preparada de forma especial. Supongamos que dos observadores separados espacialmente (Andrea y Bernardo) tienen fuentes de partículas de espín 1/2 y filtros a su disposición. Por ejemplo Andrea prepara electrones y Bernardo

²⁶Por ejemplo, para $\beta = 0$ y $\beta' = \frac{\pi}{2}$, mediríamos la correlación entre las mediciones de espín up en \hat{z} para la primera partícula, y espín up en \hat{x} para la segunda partícula. Como al medir la primera, la segunda queda en el estado espín down en \hat{z} , existe igual probabilidad de obtener espín up y espín down en \hat{x} , resultando una correlación nula

átomos de hidrógeno. Cada vez que Andrea arroja una partícula en un estado definido $|+\rangle$ ó $|-\rangle$, se lo comunica a Bernardo por un canal clásico (por ejemplo por teléfono), entonces Bernardo prepara y envía una partícula de su sistema en el estado opuesto. Los dos haces permanecen separados. Así, se producen N pares de partículas con espín opuesto, de los cuales N_1 son del tipo $|+\rangle|-\rangle = |+-\rangle$ y N_2 son del tipo $|-\rangle|+\rangle = |-+\rangle$, con $N_1/N = |f|^2$ y $N_2/N = |g|^2$. El ensamble compuesto es una mezcla estadística que se describe con la matriz densidad

$$\rho_m = |f|^2|+-\rangle\langle+-| + |g|^2|-+\rangle\langle-+| \quad (4.78)$$

que contiene toda la información disponible sobre el sistema compuesto. La representación matricial de ρ_m en la base producto es diagonal, con dos elementos no nulos: $\langle+-|\rho_m|+-\rangle = |f|^2$ y $\langle-+|\rho_m|-+\rangle = |g|^2$. Los términos de coherencia son todos nulos. Cada partícula se encuentra en un estado definido, de acuerdo con el método de preparación, pero desconocido por un observador antes de la medición. Esta es la esencia de la estadística clásica, en oposición con el estado global puro, en el que el estado de cada partícula no sólo es desconocido sino que está indeterminado. Ambos sistemas, puro y mixto, pueden ser determinados experimentalmente midiendo sus observables, \mathbf{P} y $C_{i,j}$. A través de las matrices reducidas de los haces de Andrea y Bernardo, se encuentra que $P_z^{(1)} = -P_z^{(2)} = |f|^2 - |g|^2$, y las componentes x e y , se anulan, al igual que en el estado puro. Por otro lado, ambos estados comparten $C_{zz} = -1$. En el experimento de Bernardo y Andrea las partículas están correlacionadas, como indica el valor de $C_{zz} = -1$. Sin embargo, en la mezcla estadística todas las otras componentes del tensor $C_{i,j}$ se anulan, en claro contraste con el estado $|\psi\rangle$ de la Ec.(4.55). La correlación es clásica, y surgió por el método de preparación de la mezcla, que combinó operaciones locales y comunicación clásica (LOCC, local operations and classical communication). Es conveniente remarcar nuevamente que un conjunto de partículas en estados bien definidos, aunque diferentes, debe ser descripto por una mezcla estadística, y no puede ser representado por superposiciones lineales.

Finalmente, notemos que ρ_m puede ser escrita como

$$\rho_m = |f|^2(|+\rangle\langle+|\otimes|-\rangle\langle-|) + |g|^2(|-\rangle\langle-|\otimes|+\rangle\langle+|) = |f|^2\rho_1^{(1)}\otimes\rho_2^{(1)} + |g|^2\rho_1^{(2)}\otimes\rho_2^{(2)}, \quad (4.79)$$

es decir, un caso particular de la expresión general de estado *separable correlacionado*

$$\rho = \sum_i p_i \rho_1^{(i)} \otimes \rho_2^{(i)}. \quad (4.80)$$

El estado (4.79) no puede ser expresado de una manera factorizada $\rho_1 \otimes \rho_2$ debido a la correlación clásica. Mezclas como la de Ec.(4.80) son los estados más

4.4. DISPERSIÓN DE HACES DE PARTÍCULAS CON ESPÍN 1/2.

generales que pueden producirse mediante LOCC. Entonces, por estos métodos no es posible lograr mezclas entrelazadas. *Para lograrlo, es necesario que las partículas interactúen para producir la correlación cuántica.*

En resumen, la característica del entrelazamiento parece sugerir que la naturaleza es fundamentalmente no-local, ya que el resultado de mediciones locales sobre la segunda partícula está determinado por correlaciones cuánticas codificadas solamente en el estado global entrelazado del sistema compuesto.

4.4.3 Estados con entrelazamiento máximo

Habíamos discutido previamente que el estado global puro $|\psi\rangle$ entrelazado (4.55) predice una anticorrelación estricta con respecto a mediciones a lo largo de la dirección de cuantización. Es decir, que si una de las partículas se midió en un cierto estado con respecto al eje z , up o down, podemos predecir que su par de colisión en el otro haz inmediatamente es “proyectado” en el estado de espín opuesto, aún antes de pasar por el detector de su haz, cuando la polarización se mide con respecto a z . Esta predicción puede ser verificada experimentalmente, al obtenerse $C_{zz} = -1$. Esta gran correlación se reduce cuando los estados de las partículas se refieren a dos direcciones arbitrarias \mathbf{a} y \mathbf{b} , como se ve en Ec. (4.77). Sin embargo, el concepto de máxima correlación puede ser generalizado, si pedimos el cumplimiento de ciertas restricciones sobre las amplitudes f y g del estado.

Supongamos que orientamos el analizador del primer haz a lo largo de una dirección arbitraria $\mathbf{a}(\beta, \alpha)$ (en cuyo caso todas las partículas del primer haz serán encontradas en un estado de espín definido con respecto a \mathbf{a} luego de la medición). Surge la pregunta si será posible, y bajo qué condiciones, encontrar una dirección $\mathbf{b}_0(\beta, \alpha)$ para el segundo analizador de forma tal que exista correlación o anticorrelación perfectas entre ambas mediciones, es decir que se cumpla $|C_{\mathbf{a}, \mathbf{b}_0}| = 1$. Si se cumplen estas condiciones, entonces puede asegurarse que ambas partículas del par colisionante serán encontradas en los mismos estados de espín, u opuestos, con respecto a las direcciones \mathbf{a} y \mathbf{b}_0 . O sea que el resultado de una medición podrá siempre ser predicho con certeza si se conoce el resultado de la otra. Si tal dirección \mathbf{b}_0 existe para cualquier elección de \mathbf{a} , diremos que el estado compuesto de las dos partículas que interactuaron en el pasado es *máximamente entrelazado*.

Analicemos esta pregunta para el estado $|\psi\rangle$ de la Ec.(4.55). Es posible demostrar (*ejercicios*) que el entrelazamiento máximo se dá únicamente si se cumple la condición

$$2|f||g| = 1 . \quad (4.81)$$

Bajo esta condición, es posible conseguir *anticorrelación perfecta* eligiendo

$$\alpha'_0 = (\pi + \alpha - \delta) \quad \text{y} \quad \beta'_0 = \beta. \quad (4.82)$$

Análogamente, *correlación perfecta* se obtiene para

$$\alpha'_0 = (\alpha - \delta) \quad \text{y} \quad \beta'_0 = (\pi - \beta). \quad (4.83)$$

En las ecuaciones anteriores α y β definen la orientación del primer analizador, δ es la fase relativa de las componentes de $|\psi\rangle$.

Entonces, cuando la condición (4.81) se cumple, para cualquier elección de la dirección \mathbf{a} , existen dos direcciones \mathbf{b}_0 bien definidas, relacionadas con la orientación del primer analizador de acuerdo con las Eqs. (4.82) y (4.83), para las que se cumple $|C_{\mathbf{a},\mathbf{b}_0}| = 1$. Es decir, si una partícula del primer haz se proyecta con espín up (down) con respecto a \mathbf{a} , entonces su par de colisión en el segundo haz se orientará automáticamente con su espín paralelo (antiparalelo) inmediatamente al finalizar la primera medición. El comportamiento de un sistema está condicionado por el comportamiento del otro. Al ser el estado $|\psi\rangle$ entrelazado, cada partícula colisionante no puede estar en un estado cuántico puro, caracterizado por un vector de estado. Lo que tenemos antes de una medición es un vector de onda conjunto que describe el sistema completo. Al producirse una medición sobre una de las partículas, inmediatamente la otra es proyectada en un estado de espín bien definido, con total certeza. Si la dirección de \mathbf{a} cambia durante las mediciones, entonces \mathbf{b}_0 se ajusta de tal forma que se cumpla la condición para la máxima correlación. *Esta fuerte conexión entre las direcciones \mathbf{a} y \mathbf{b}_0 es producto de las correlaciones intrínsecas de los haces, debido a la interacción cuántica.*

Entonces, en la situación de máximo entrelazamiento, el vector de estado tiene la forma general

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + e^{i\delta}|-+\rangle). \quad (4.84)$$

Comprobamos fácilmente que las matrices densidad reducidas en este caso son:

$$\rho_1 = \rho_2 = \frac{1}{2}\mathbf{1}, \quad (4.85)$$

y los vectores de polarización individuales se anulan (ver Ec. (4.63)):

$$\mathbf{P}^{(1)} = \mathbf{P}^{(2)} = 0. \quad (4.86)$$

4.4. DISPERSIÓN DE HACES DE PARTÍCULAS CON ESPÍN 1/2.

Es posible comprobar (*ejercicio*) que, en general los vectores de polarización satisfacen la siguiente relación con las amplitudes de las componentes del estado compuesto:

$$(\mathbf{P}^{(1)})^2 = (\mathbf{P}^{(2)})^2 = 1 - (2|f||g|)^2. \quad (4.87)$$

Esta relación muestra explícitamente que el grado de entrelazamiento y la magnitud de la polarización están relacionadas.

Finalmente, la sustitución de la condición de entrelazamiento máximo en los coeficientes $C_{i,j}$ dá las componentes del tensor de correlaciones para estados máximamente entrelazados de la forma (4.84)

$$C_{x,x} = C_{y,y} = \cos \delta \quad ; \quad C_{x,y} = -C_{y,x} = -\sin \delta \quad ; \quad C_{z,z} = -1. \quad (4.88)$$

Vale la pena remarcar nuevamente en este punto, la relación entre el grado de polarización de los subsistemas individuales y el grado de entrelazamiento. A mayor entrelazamiento del sistema compuesto, es menor la información disponible sobre cada uno de los subsistemas. Vimos que en el estado máximamente entrelazado, las submatrices reducidas contienen menor información que el estado compuesto²⁷. En particular, la coherencia que caracteriza al sistema compuesto ha desaparecido en el estado de cada uno de los subsistemas.

Para estados de la forma general de la forma (4.55), el parámetro $E = 2|f||g|$ brinda de alguna manera una medida de la intensidad del entrelazamiento. Vemos que si el estado está normalizado, $0 \leq E \leq 1$. Este parámetro se anula si f ó g son nulos, en cuyo caso el estado compuesto es separable, es decir no entrelazado. El máximo valor de E se alcanza para entrelazamiento máximo.

4.4.4 Entropía del entrelazamiento

Consideremos ahora estrategias para cuantificar el entrelazamiento de estados bipartitos puros más generales que (4.55). Por ejemplo, se ha mostrado que el entrelazamiento de un estado bipartito puro puede ser unívocamente caracterizado por la entropía de von-Neumann, definida para cada subsistema como²⁸

$$S(\rho_i) = -\text{Tr} \rho_i (\log_2 \rho_i) = -\sum \lambda_n \log_2 \lambda_n, \quad (4.89)$$

²⁷"Maximal knowledge of the whole does not imply maximal knowledge of all its parts, not even when these are completely separated from one another" E. Schrödinger.

²⁸Ver por ejemplo S. Popescu and D. Rohrlich, Phys. Rev. A 56, 3319.

donde λ_n son los autovalores de ρ_i ,

$$\rho_i = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}. \quad (4.90)$$

El logaritmo de ρ_i es definido como

$$\log_2 \rho_i = \begin{pmatrix} \log_2 \lambda_1 & 0 \\ 0 & \log_2 \lambda_2 \end{pmatrix}, \quad (4.91)$$

Es conveniente notar, que ambos subsistemas tienen el mismo valor de la entropía, ya que ambas matrices reducidas tienen los mismos autovalores no nulos, y por lo tanto la misma entropía.

La elección de $S(\rho_i)$ como medida del entrelazamiento puede justificarse formalmente. Aquí analizaremos esta definición nuevamente con el ejemplo especial (4.55). Si el estado $|\psi\rangle$ está máximamente entrelazado, los dos subsistemas individuales tienen polarización nula y las matrices reducidas son de la forma (4.85). Si se realizan mediciones en cada uno de los subsistemas, se encontrará una distribución aleatoria de partículas con espín up y down a lo largo de cualquier dirección que se elija para la medición. En el lenguaje de la teoría de la información, diremos que la incerteza del resultado de la medición es máxima, o que cada subsistema está *máximamente mezclado*. En este caso, la entropía de von-Neumann alcanza su máximo:

$$S(\rho_i) = -\log_2 \frac{1}{2} = 1. \quad (4.92)$$

Entonces, para entrelazamiento máximo del sistema compuesto, tenemos máximo valor de la entropía de cada subsistema. Por otro lado, si los dos subsistemas están completamente polarizados, $|\mathbf{P}^{(1)}| = |\mathbf{P}^{(2)}| = 1$, lo que implica que ambos subsistemas se encuentran en un estado puro, con representaciones matriciales de la forma:

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.93)$$

ó

$$\rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.94)$$

El vector de estado es necesariamente separable, $|\psi\rangle = |+\rangle|-\rangle$. En este caso, $S(\rho_i) = -\log_2 1 = 0$. Así, al entrelazamiento nulo del estado conjunto, le corresponde una entropía cero. Los estados puros contienen la máxima información posible sobre el subsistema, y la entropía es la mínima. Para el caso general de la forma (4.55), la entropía vale

$$S(\rho_1) = S(\rho_2) = -|f|^2 \log_2 |f|^2 - |g|^2 \log_2 |g|^2. \quad (4.95)$$

4.5 Estados de Bell. Correlaciones en el estado singlete

Ahora discutiremos un ejemplo de estado entrelazado de mucha importancia conceptual. Se trata del estado *singlete*, que forma parte de un conjunto de cuatro estados máximamente entrelazados, mutuamente ortogonales, que conforman una base para cualquier sistema de dos partículas con espín 1/2. Estos son casos particulares de (4.84), y se denominan estados de Bell:

$$\begin{aligned} |\psi_{-}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \\ |\psi_{+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |\phi_{\pm}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle \pm |--\rangle) \end{aligned} \quad (4.96)$$

El primer estado corresponde a $\delta = \pi$ y se denomina *singlete*. El segundo es el *triplete*, y corresponde a $\delta = 0$. Los cuatro estados son máximamente entrelazados. Sus matrices densidad reducidas son proporcionales a la matriz identidad, y por lo tanto la entropía de Von Neumann alcanza su máximo.

Una característica importante del estado singlete es la de su invariancia ante rotaciones en el espacio de espín, debido a que su espín total es cero. Por ello, $|\psi_{-}\rangle$ conserva su forma en cualquier base. Por ejemplo, elijamos el vector a como dirección de cuantización, y denotemos $|a(+)\rangle$ y $|a(-)\rangle$ los estados con espín up y down, respectivamente, en esa dirección. Estos estados pueden ser expresados en términos de la base z ,

$$\begin{aligned} |a(+)\rangle &= |+\rangle \cos\frac{\beta}{2} + |-\rangle \sin\frac{\beta}{2} \\ |a(-)\rangle &= |+\rangle \sin\frac{\beta}{2} - |-\rangle \cos\frac{\beta}{2}, \end{aligned} \quad (4.97)$$

y la invariancia rotacional permite que podamos escribir directamente

$$|\psi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|a(+)\rangle|a(-)\rangle - |a(-)\rangle|a(+)\rangle] \quad (4.98)$$

con la misma estructura de $|\psi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle - |-+\rangle]$. Ambas expresiones contienen la misma información sobre el sistema compuesto, y es evidente que previo a cualquier medición, no es posible asignar un estado de espín definido a un subsistema. Las matrices reducidas son proporcionales a la matriz identidad, y los vectores de polarización son nulos. Midiendo un subsistema encontraremos aleatoriamente estados up y down. Pero, observando en coincidencia, detectaremos la correlación característica del estado entrelazado. El grado de correlación entre las dos mediciones lo caracterizamos calculando

los coeficientes $C_{(a,b)}^{(1,2)}$ usando la expresión $C_{(a,b)}^{(1,2)} = \sum_{i,j} a_i b_j C_{i,j}$, y los coeficientes $C_{i,j}$ correspondientes al estado singlete. Obtenemos

$$C_{(a,b)}^{(1,2)} = -\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \quad (4.99)$$

Considerando, por simplicidad, que \mathbf{a} y \mathbf{b} yacen en el plano $x - z$, resulta

$$C_{(a,b)}^{(1,2)} = -\cos(\beta - \beta').$$

Si $\mathbf{a} \parallel \mathbf{b}$ (ó antiparalelo), resulta $C_{(a,b)}^{(1,2)} = -1(1)$. Si $\beta - \beta' = \pi/2$, $C_{(a,b)}^{(1,2)} = 0$, es decir ausencia de correlación. Es interesante para la discusión re-obtener los coeficientes de correlación en términos de las probabilidades conjuntas

$$W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{Mm} = |\langle a(M)b(m) | \psi_- \rangle|^2,$$

de que la primera partícula de un par colisionante sea hallada con componente M respecto de \mathbf{a} y la segunda con m respecto de \mathbf{b} :

$$\begin{aligned} W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{++} &= \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\beta - \beta'}{2} \\ W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{+-} &= \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\beta - \beta'}{2} \\ W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{-+} &= \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\beta - \beta'}{2} \\ W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{--} &= \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\beta - \beta'}{2} \end{aligned} \quad (4.100)$$

Vemos que para $\beta = \beta'$, es

$$W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{++} = 0 = W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{--}, \quad \text{y} \quad W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{+-} = \frac{1}{2} = W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{-+}.$$

Recordando la expresión (4.72) para los coeficientes de correlación en función de las probabilidades conjuntas, concluimos que en este caso tenemos resultados perfectamente anticorrelacionados. Rotando el segundo detector a direcciones con $\beta' = \beta \pm \pi/2$, se encuentra que todas las probabilidades son iguales a 1/4, lo que implica ausencia de correlación entre las mediciones.

Para avanzar en la discusión del concepto de entrelazamiento, proveyendo intuición sobre los resultados descriptos hasta ahora, reinterpretemos las probabilidades conjuntas calculadas más arriba. Supongamos que el primer observador elige una dirección arbitraria \mathbf{a} y la mantiene fija. Puede elegirla

luego de que las partículas hayan interactuado, cuando éstas ya se han separado nuevamente. Las mediciones de coincidencia pueden hacerse de modo tal que las del primer haz se miden primero. Entonces, cada partícula del primer haz se proyecta en uno de los dos estados del detector, $|a(+)\rangle$ ó $|a(-)\rangle$. Ahora supongamos que una partícula fue hallada en $|a(+)\rangle$. De acuerdo con los principios de la mecánica cuántica, la Ec. (4.98) dice que su par de colisión del segundo haz, que aún no fue analizada, es proyectada en el estado $|a(-)\rangle$, en el momento de la medición de la primer partícula. Luego, la segunda partícula ingresa en su detector, orientado en \mathbf{b} , y es proyectada en alguno de los dos estados $|b(+)\rangle$ ó $|b(-)\rangle$, con probabilidades $|\langle b(+)|a(-)\rangle|^2$ y $|\langle b(-)|a(-)\rangle|^2$, respectivamente. Estas probabilidades pueden recalcularse de una manera diferente, que puede resultar útil para el análisis:

$$W(\mathbf{a}, \mathbf{b})_{++} = |\langle a(+)b(+)|\psi_{-}\rangle|^2 = \frac{1}{2}|\langle b(+)|a(-)\rangle|^2 \quad (4.101)$$

en donde hemos utilizado (4.98) y la ortogonalidad de los estados $|a(+)\rangle$ y $|a(-)\rangle$. El pre-factor $1/2$ en la ecuación anterior es la probabilidad de detectar la primera partícula en el estado $|a(+)\rangle$. El otro factor es la probabilidad de que el otro miembro de la colisión, que con certeza se proyectó en $|a(-)\rangle$ al finalizar la medición de la primera partícula, sea hallado en el estado $|b(+)\rangle$ luego de pasar por su detector.

Es interesante notar que entre las dos mediciones, la segunda partícula está en un estado cuántico definido, sea o no observada, como consecuencia del entrelazamiento del sistema compuesto. Esta discusión muestra la esencia de los estados entrelazados. Realizando un experimento sobre solo una de las partículas, no solo puede establecerse el vector de estado de ella por la medición, sino que también el estado de su compañera de interacción puede inferirse sin interactuar con ella, e independientemente de la distancia que haya entre ambas partículas. Esta característica extraordinaria de la mecánica cuántica es denominada *no-localidad*.

Estas predicciones para estados entrelazados fueron formuladas siguiendo estrictamente las reglas de la mecánica cuántica. Como se comentó al comienzo, el trabajo de EPR planteó una controversia entre estos resultados y la intuición o el “sentido común” basado en la suposición de que la descripción de los fenómenos físicos debe combinar dos aspectos fundamentales:

- 1.- **Localidad:** el resultado de una medición sobre un sistema dado debería ser insensible a operaciones sobre un sistema distante, con el cual ha interactuado en el pasado.
- 2.- **Realismo:** las partículas deberían poseer propiedades definidas, sean o no observadas.

A partir de esta aparente paradoja, surgieron propuestas teóricas basadas en la existencia de *variables ocultas* (“hidden variables”) que pudieran explicar el comportamiento probabilístico de materia, mediante una teoría “local y realista”. Sin embargo, en 1965 Bell demostró un notable teorema que afirma que no existe ninguna teoría local-realista que reproduzca todos los resultados mecánico-cuánticos.

4.6 Desigualdades de Bell

El planteo de EPR de que la descripción de la realidad física por medio de la mecánica cuántica es incompleto sugiere la existencia de una descripción más detallada de la naturaleza, quizá asociada con el uso de una tecnología más avanzada que la que disponemos actualmente, de tal forma que todas nuestras predicciones serían inambiguas, en lugar de probabilísticas.

Por ejemplo, seríamos capaces de predecir de qué manera sería deflectado un átomo de plata que atraviesa un aparato de Stern-Gerlach, up o down. Esta descripción más detallada involucraría información adicional sobre el átomo de plata, el magneto de Stern-Gerlach y tal vez sobre el horno que produce los átomos de plata. Esta información adicional recibió el nombre de ‘variables escondidas’, y en el contexto de las teorías de variables escondidas, los cálculos podrían estar basados en un promedio en el ensemble sobre la distribución estadística propuesta para dichas variables, brindando las predicciones estadísticas de la teoría cuántica. El carácter probabilístico de la mecánica cuántica sería debido a una especificación incompleta de la información física, de la misma manera que en mecánica estadística clásica. Así, un valor de expectación tendría un carácter conceptual similar al de un promedio clásico. En este marco conceptual, la medición es fundamentalmente determinista, pero aparece como probabilística debido a que algunos grados de libertad no son conocidos con precisión.

Las suposiciones de realidad y localidad de EPR fueron recogidas por J. Bell, quien formuló estas hipótesis de forma más precisa, mostrando que ellas podrían ser realmente verificables experimentalmente. Bell derivó un conjunto de desigualdades que involucran cantidades medibles, para las cuales las predicciones mecánico cuánticas difieren de aquellas originadas en cualquier teoría local-realista. La consecuencia más importante de estos resultados, es que cuestiones que rozan el aspecto filosófico de la mecánica cuántica *pueden ser resueltas mediante experimentos de una manera directa*. Entonces, si la mecánica cuántica describe correctamente la naturaleza, debemos concluir que la no-localidad es una característica importante de nuestro mundo. Discutiremos

4.6. DESIGUALDADES DE BELL

los aspectos fundamentales detrás de estos resultados, en particular, la desigualdad de Bell a través de la versión presentada por J.F. Clauser, M.A. Horne, A. Shimony, and R.A. Holt conocida en la literatura como desigualdad CHSH ²⁹.

El razonamiento que lleva a la desigualdad de Bell considera un conjunto de pares de partículas que pueden ser observadas una vez que están muy alejadas entre ellas de forma que no pueden interactuar, y que originalmente se han correlacionado entre ellas por la interacción que tuvieron, como en un experimento de scattering, o por haber sido emitidas por una fuente de pares correlacionados (por ejemplo fotones entrelazados). Este tipo de experimento se discute de dos formas esencialmente diferentes, que parten de premisas de naturaleza muy distinta.

Suposición de localidad y realidad

Se asume que la correlación estadística de las partículas al momento de ser observadas se originó por información “llevada y localizada en cada partícula”. Al ser generadas, las partículas estuvieron en contacto compartiendo información, y se supone que al ser observadas cada una de ellas estará en un estado definido por el observable y por las variables escondidas. Más concretamente, consideremos un estado de dos partículas, A y B, de espín 1/2, en el que las partículas están alejadas entre ellas. Llamamos A_a y B_b a mediciones de proyecciones en las direcciones a y b , realizadas sobre las partículas A y B respectivamente. El resultado de la medición A_a (B_b), cuyo valor puede ser ± 1 , puede depender de la dirección a (b) y de otros parámetros no-controlados, representados colectivamente como λ . El parámetro λ puede depender del sistema, del aparato de medición o de ambos y usualmente se lo llama ‘variable oculta’. Esta suposición es también denominada suposición de existencia de variables ocultas. Entonces, si se *asume* que A_a (B_b) tiene un valor definido $A_a(\lambda)$ ($B_b(\lambda)$) previo a la medición (*suposición de realidad*), la medición simplemente revelaría este valor. Además, se supone que el resultado de la medición en A (B) no depende de las mediciones realizadas en B (A). Por ejemplo, $A_a(\lambda)$ no depende de b (*suposición de localidad*).

Al parámetro λ se le asigna una distribución de probabilidad $\rho(\lambda)$, que satisface la condición de normalización:

$$\int \rho(\lambda) d\lambda = 1, \quad \rho(\lambda) \geq 0. \quad (4.102)$$

La función de correlación para el estado de dos partículas, para una medición en

²⁹J.F. Clauser, M.A. Horne, A. Shimony, and R.A. Holt, Phys. Rev. Lett. **23**, 880 (1969)

una dirección fija a para la partícula A y en una dirección fija b para la partícula B, está dada, en la suposición de variables ocultas, por

$$E_{(a,b)}^{(A,B)} = \int A_a(\lambda)B_b(\lambda)\rho(\lambda)d\lambda , \quad (4.103)$$

donde $A_a(\lambda) = \pm 1$ y $B_b(\lambda) = \pm 1$, porque los valores de las mediciones son supuestos ± 1 . Supongamos que los observadores de las dos partículas A y B pueden elegir entre dos observables a, a' y b, b' , y los respectivos resultados son $A_a, A_{a'}$ y $B_b, B_{b'}$. Definimos la siguiente relación de coeficientes de correlación, a la cual denominamos función de Bell

$$\Delta_{LR} \equiv E_{(a,b)}^{(A,B)} + E_{(a',b')}^{(A,B)} + E_{(a',b)}^{(A,B)} - E_{(a,b')}^{(A,B)} ,$$

donde el subíndice LR indica teoría local y realista. Por definición, se cumple

$$\Delta_{LR} = \int d\lambda [A_a(\lambda)(B_b(\lambda) - B_{b'}(\lambda)) + A_{a'}(\lambda)(B_b(\lambda) + B_{b'}(\lambda))] \rho(\lambda) . \quad (4.104)$$

Ahora, $B_b(\lambda) + B_{b'}(\lambda)$ y $B_b(\lambda) - B_{b'}(\lambda)$ pueden tomar los valores ± 2 y 0 , ó 0 y ± 2 respectivamente. En consecuencia³⁰,

$$- 2 \leq \Delta_{LR} \leq 2 . \quad (4.105)$$

Notemos que para obtener esta desigualdad no hemos usado la mecánica cuántica. Solamente asumimos el principio de localidad y la existencia de variables ocultas. Consecuentemente, una desigualdad de Bell es una restricción que cualquier teoría que sea tanto realista como local tiene que satisfacer.

Argumento cuántico

Retomemos la desigualdad anterior, pero ahora calculando los coeficientes de correlación como valores de expectación, tal como los definimos en la Ec.(4.65). Vimos en la Ec.(4.99) que para el estado singlete los coeficientes de correlación están dados por el coseno que forman las direcciones de medición, con signo menos, $C_{(a,b)}^{(A,B)} = -\cos(\theta_{a,b})$. Así, es fácil verificar que, la versión cuántica de la función de Bell

$$\Delta_Q \equiv C_{(a,b)}^{(A,B)} + C_{(a',b')}^{(A,B)} + C_{(a',b)}^{(A,B)} - C_{(a,b')}^{(A,B)} ,$$

³⁰La ecuación (4.104) es un promedio sobre el ensamble de la variable oculta de productos de funciones estocásticas A y B que toman valores ± 1 . El valor medio de cada uno de los dos sumandos tiene módulo menor que dos, y ambos sumandos se cancelan alternadamente cuando el otro es no nulo.

4.6. DESIGUALDADES DE BELL

toma su valor máximo cuando las direcciones son coplanares, elegidas de tal manera que los ángulos entre a y b , b y a' , a' y b' sean iguales a $\pi/4$ ³¹.

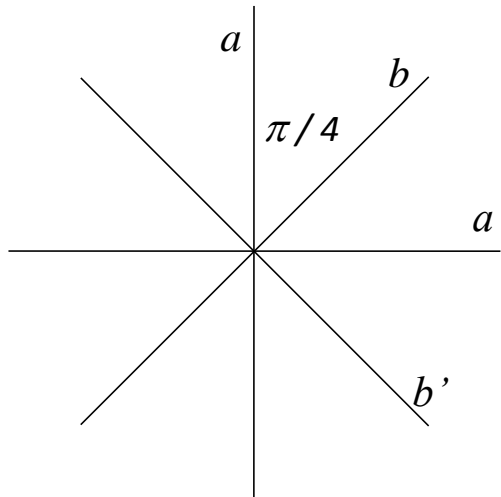


FIGURE 4.1: Diagrama esquemático mostrando las direcciones a, b, a', b' para obtener máxima violación de la desigualdad de Bell por el estado singlete.

La Figura 4.1 muestra esquemáticamente el arreglo de direcciones para lograr el máximo de Δ_Q . En tal caso

$$|\Delta_Q| = 2\sqrt{2} \quad (4.106)$$

Claramente, este resultado viola la desigualdad (4.105).

Aunque existen otras configuraciones para los cuatro vectores en las que los resultados cuánticos están de acuerdo con (4.105), el resultado (4.106) es muy importante ya que muestra que es imposible comprender todos los resultados de la teoría cuántica en un marco teórico local. Las correlaciones cuánticas pueden ser más fuertes de lo que puede llegar a presentarse entre sistemas clásicos.

De esta forma, se llega a concluir que existen configuraciones experimentales; que violan la desigualdad de Bell (Ec.(4.105)). Este es un ejemplo de una situación especial donde la predicción de la mecánica cuántica no puede ser reproducida por teorías de carácter local y real.

³¹A. Sen(De), U. Sen, M. Lewenstein, and A. Sanpera, *The Separability versus Entanglement Problem* Ch. 8 in *Lectures on Quantum Information*, Ed. Dagmar Bruß, G. Leuchs (2007).

4.7 Bibliografía recomendada

- K. Blum *Density Matrix Theory and Applications*, 3rd Ed., Springer (2012).
- D. Dehlinger and M.W. Mitchell, *Entangled photons, nonlocality and Bell inequalities in the undergraduate laboratories*, J. Am. Phys. **70**, 903 (2002).
- D. Dehlinger and M.W. Mitchell, *Entangled photons apparatus for the undergraduate laboratory*, J. Am. Phys. **70**, 898 (2002).
- G. Auletta, *Foundations and Interpretation of Quantum Mechanics*, World Scientific (2001).
- D. Zeh, *Roots and Fruits of Decoherence*, Seminaire Poincaré **1**, 115-129 (2005).

Para el modelo espín-bosón:

- J. Luczka, *Spin in contact with thermostat: exact reduced dynamics*, Physica A **167**, 919 (1990).
- R. Alicki, *Pure Decoherence in Quantum Systems*, Open Sys. & Information Dyn. **11**, 53 (2004).
- A. Arvind, *The EPR paradox: Einstein scrutinises quantum mechanics*, Resonance, **5**, 28 (2000) doi.org/10.1007/BF02837903.

4.7. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

Parte IV

**Relatividad General y
Cosmología**

CAPÍTULO 5

RELATIVIDAD GENERAL

5.1 Introducción

La gravedad es una de las cuatro interacciones fundamentales. La teoría clásica (es decir, no cuántica) que trata de la gravedad es la Teoría de la Relatividad General, propuesta por Albert Einstein en 1915 y constituye el tópico del presente capítulo. Los orígenes de esta teoría se remontan a la revolución conceptual que siguió a la introducción de la Relatividad Especial por Einstein en 1905. De acuerdo con la ley de gravitación de Newton, dos masas puntuales se atraen mutuamente con una fuerza proporcional a sus masas e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia entre ellas. Así, la fuerza sobre una de las masas en un instante de tiempo depende de la posición de la otra en el mismo instante. Cualquier variación en la posición de una de ellas se transmite instantáneamente a la otra. No obstante, dicha interacción instantánea entra en contradicción con la Relatividad Especial, de acuerdo con la cual ninguna señal puede viajar más rápido que la luz. Por lo tanto, la teoría newtoniana de la gravedad (altamente exitosa en la descripción de una enorme cantidad de fenómenos) solo puede ser una aproximación a otra teoría más fundamental.

La relatividad general no propone una nueva ley de fuerzas ni constituye una nueva teoría para el campo gravitatorio, sino que se basa en un profundo cambio conceptual de la concepción del espacio y el tiempo. Einstein percibió que el hecho experimental de que todos los cuerpos caen con la misma aceleración en un campo gravitatorio (independientemente de su masa) puede interpretarse en términos de un espacio-tiempo curvo. En este esquema conceptual las masas curvan el espacio-tiempo a su alrededor y las trayectorias de otras masas

en las inmediaciones son "líneas rectas" (curvas de longitud mínima) en ese espacio-tiempo curvo. La relatividad general es entonces una teoría geométrica. Vamos a comenzar por lo tanto con una breve introducción a las geometrías no-euclidianas.

5.2 Geometrias no euclidianas

La idea de una geometría no euclidiana se ilustra fácilmente en dos dimensiones. En la geometría euclidiana se trabaja en base a las nociones de punto, línea recta, distancia, ángulos, paralelas, círculos, etc.. Entre los teoremas mas familiares podemos mencionar que la suma de los ángulos interiores de un triángulo equivale a π o que el cociente entre el perímetro y el radio de un círculo es 2π , entre muchos otros.

La superficie de una esfera nos brinda un ejemplo sencillo de una geometría diferente (no euclidiana), en la cual los resultados anteriormente mencionados de la geometría en el plano no son válidos y deben ser reemplazados por definiciones y teoremas diferentes. Por ejemplo, en la geometría esférica el concepto de línea recta se reemplaza por el de **círculo máximo** o **gran círculo**, el cual se define como la curva que se obtiene al intersectar la esfera con un plano que pasa por el centro de la misma. Así, mientras que en el plano dos rectas o bien nunca se cortan (paralelas) o se cortan en un único punto, dos rectas arbitrarias (círculos máximos) en la esfera siempre se cortan en dos puntos (diametralmente opuestos).

La distancia entre dos puntos de la esfera se define como la curva de menor longitud sobre la esfera que une ambos, también llamada geodésica; se demuestra que la misma coincide siempre con un segmento de círculo máximo. Un triángulo se construye a través de la intersección de tres círculos máximos (al igual que en el plano se construye a través de la intersección de tres rectas); un círculo se define como el conjunto de puntos equidistantes de otro (con la definición de distancia dada anteriormente), etc.. El ángulo entre dos círculos máximos se puede definir como el ángulo entre dos rectas en el espacio tridimensional tangentes a dichos círculos en el punto de intersección. Notemos que un triángulo esférico puede tener tres ángulos interiores rectos, con lo cual su suma es superior a π . En general, puede demostrarse que la suma de los ángulos interiores de un triángulo esférico es igual a $\pi + A/a^2$, donde A es el área del triángulo y a el radio de la esfera. Notemos que en el caso de triángulos muy pequeños comparados con las dimensiones de la esfera $A/a^2 \ll 1$, recuperamos el resultado de la geometría plana con buena aproximación. También puede demostrarse fácilmente (queda como ejercicio para el lector) que el cociente entre

el perímetro P y el radio r de un círculo arbitrario sobre la esfera es

$$\frac{P}{r} = 2\pi \frac{\sin(r/a)}{(r/a)} \quad (5.1)$$

Nuevamente, si $r \ll a$ recuperamos el resultado de la geometría plana.

Puede dar la impresión de que para determinar la geometría de un objeto bidimensional uno debe trabajar en el espacio tridimensional en el cual el objeto se encuentra embebido. No obstante, es posible determinar la geometría de manera puramente local (es decir, sin salir al espacio tridimensional). Una persona sobre la superficie de una esfera (la tierra) puede medir cosas como ángulos interiores de triángulos, perímetros y radios de círculos, etc.. Ajustando entonces las fórmulas anteriores puede determinar si la geometría de ese espacio es efectivamente esférica y estimar en ese caso el radio de la esfera, sin necesidad de una dimensión extra.

En el caso de geometrías curvas tridimensionales, la visualización no es tan simple como en el caso bidimensional, en el cual a menudo una geometría curva puede representarse como una superficie en un espacio euclideo tridimensional. No obstante, en algunos casos simples podemos extender esta idea y pensar ciertas geometrías curvas tridimensionales como hipersuperficies embebidas en un hipotético espacio euclideo de cuatro dimensiones. Por ejemplo, el análogo de la esfera bidimensional en tres dimensiones es la hipersuperficie (volumen) de una esfera en cuatro dimensiones, al cual llamaremos una **triesfera**. Si nuestro espacio físico tuviera la geometría de una triesfera, un viaje en línea recta tarde o temprano nos llevaría de vuelta al punto de partida. No obstante, al igual que en el caso bidimensional, podemos obtener una información mucho mas detallada acerca de la geometría del espacio mediante cálculos puramente locales (sin necesidad de emprender un viaje tan incierto). Por ejemplo, puede demostrarse que el volumen encerrado por una esfera bidimensional (la esfera normal) de radio r en tal geometría espacial esta dado por

$$V = 4\pi a^3 \left\{ \frac{1}{2} \sin^{-1} \left(\frac{r}{a} \right) - \frac{r}{2a} \left[1 - \left(\frac{r}{a} \right)^2 \right]^{1/2} \right\}$$

donde a es el radio de la triesfera. Es facil ver que para $r \ll a$ se recupera el resultado familiar $V \approx 4\pi r^3/3$. Así, mediante mediciones de radios y volúmenes de esferas bidimensionales es posible determinar si la geometría del espacio es la de una triesfera.

Para cada número de dimensiones existe una cantidad infinita de posibles geometrías. Así, por ejemplo, en dos dimensiones además del plano y la esfera existe la geometría de un huevo o de cualquier otra superficie suave. Como

podemos describir y comparar matemáticamente estas diferentes geometrías? Lo que hemos hecho hasta ahora con la esfera y la triesfera es describir estos espacios considerandolos embebidos en un espacio euclidiano de dimensión mayor. Este método que funciona bien en dos dimensiones, se complica bastante para geometrías tridimensionales más complicadas que la triesfera y en el caso de cuatro dimensiones resulta completamente inviable. Otra posibilidad para especificar una geometría es dar un conjunto pequeño de postulados o axiomas y deducir mediante teoremas las diferentes propiedades del objeto. Para la geometría del plano, por ejemplo, tenemos los cinco postulados de Euclides: por dos puntos pasa una única recta, las paralelas nunca se intersectan, etc.. La superficie de la esfera puede ser descrita por el mismo conjunto de axiomas, excepto el de las paralelas; este último se reemplaza por el postulado de que dos rectas cualesquiera siempre se intersectan en dos puntos. Sin embargo este método también es bastante limitado. ¿Que postulados describen la superficie de una papa?

La descripción local más general de una geometría hace uso del cálculo diferencial e integral, mediante la especificación de la distancia entre cada par de puntos cercanos. A partir de la distancia entre puntos cercanos, la distancia a lo largo de curvas puede ser obtenida por integración. De esta manera, las "líneas rectas" se definen como las curvas de menor distancia entre dos puntos. Los ángulos se definen como el cociente entre la longitud de un arco de curva y sus radios, cuando estos radios son pequeños, etc.. Esta área de la matemática se conoce como **geometría diferencial**. Vamos a introducir algunas de sus ideas básicas.

5.2.1 Geometría euclidiana del plano

Un pre-requisito para establecer la distancia entre puntos cercanos es disponer de un sistema de coordenadas, el cual por supuesto no es único. Por ejemplo, en dos dimensiones podemos usar coordenadas cartesianas o coordenadas polares respecto de un cierto origen, así como muchos otros sistemas de coordenadas (ver Fig.5.1). Así, puntos cercanos tendrán valores parecidos de sus coordenadas. Por ejemplo, los puntos (x, y) y $(x + dx, y + dy)$ serán cercanos si dx y dy son infinitesimales. En coordenadas cartesianas la distancia dS entre los puntos (x, y) y $(x + dx, y + dy)$ viene dada por (ver Fig.5.1)

$$dS = \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2} \quad (5.2)$$

En coordenadas polares la distancia entre los puntos (r, ϕ) y $(r + dr, \phi + d\phi)$ viene dada por (ver Fig.5.1)

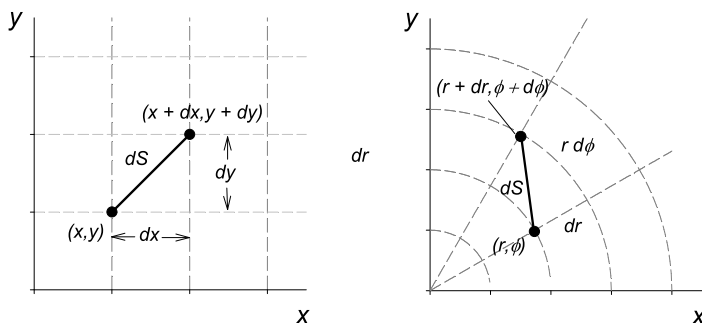


FIGURE 5.1: Distancia entre puntos cercanos en coordenadas cartesianas y polares.

$$dS = \sqrt{(dr)^2 + (r d\phi)^2} \quad (5.3)$$

Expresiones como (5.2) y (5.3) son válidas para calcular longitudes solamente si las cantidades dx y dy , ó dr y $d\phi$ son pequeñas. No obstante, distancias largas pueden ser obtenidas por integración a partir de estas relaciones infinitesimales. Por ejemplo, podemos calcular el perímetro de un círculo y analizar su relación con el radio R . Elijiendo el origen como el centro, la ecuación del círculo en coordenadas cartesianas es

$$x^2 + y^2 = R^2 \quad (5.4)$$

El perímetro es la integral de dS a lo largo del círculo. Tenemos entonces

$$P = \oint dS = \oint \sqrt{(dx)^2 + (dy)^2} \quad (5.5)$$

$$= 2 \int_{-R}^R dx \left[1 + \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 \right]^{1/2} \Big|_{x^2+y^2=R^2} \quad (5.6)$$

$$= 2 \int_{-R}^R dx \sqrt{\frac{R^2}{R^2 - x^2}} = 2\pi R, \quad (5.7)$$

que es la respuesta correcta. Derivar la relación entre el perímetro y el radio es mucho mas facil en coordenadas polares, donde la ecuación del círculo es simplemente $r = R$. Así, a partir de (5.3) tenemos

$$P = \oint dS = \int_0^{2\pi} R d\phi = 2\pi R \quad (5.8)$$

El resultado por supuesto es el mismo y la elección de uno u otro sistema de coordenadas es simplemente una conveniencia de cálculo.

Procediendo de esta manera podríamos derivar todos los teoremas de la geometría Euclidiana en el plano. Por ejemplo, podemos obtener ángulos a partir del cálculo de distancias. El ángulo entre dos rectas que se intersectan puede definirse centrando un círculo de radio R en la intersección de las rectas; el ángulo (en radianes) se define entonces como

$$\theta = \frac{\Delta C}{R} \quad (5.9)$$

donde ΔC es la longitud del arco entre las intersecciones del círculo con las rectas. A partir de esta definición es posible demostrar que la suma de los ángulos interiores de un triángulo es igual a π . De hecho, es posible verificar todos los axiomas de la geometría Euclidiana en el plano a partir de (5.2) ó (5.3). Toda la geometría puede reducirse a relaciones entre distancias; todas las distancias pueden reducirse a integrales de distancias entre puntos cercanos; toda la geometría Euclidiana en el plano esta contenida en (5.2) ó (5.3).

Resumiendo: una geometría puede especificarse mediante lo que llamaremos un **elemento de línea**, tal como (5.2) ó (5.3), el cual nos da la distancia entre puntos cercanos en términos de diferencias entre coordenadas en algún sistema. Convencionalmente, el elemento de línea se expresa como una relación cuadrática para dS^2 , como por ejemplo

$$dS^2 = dx^2 + dy^2$$

5.2.2 Geometría no-euclidiana de la esfera

Un ejemplo relativamente simple de geometría no euclidiana es la superficie de una esfera bidimensional de radio a . Para describir los puntos sobre la esfera podemos utilizar los ángulos (θ, ϕ) de las coordenadas polares tridimensionales. Se puede deducir (queda como ejercicio para el lector) que la distancia entre dos puntos cercanos (θ, ϕ) y $(\theta + d\theta, \phi + d\phi)$ sobre la esfera viene dada por

$$dS^2 = a^2(d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2) \quad (5.10)$$

Este es el elemento de línea de la superficie de la esfera, a través del cual pueden obtenerse todas las propiedades de la geometría esférica. Veamos por ejemplo la razón entre perímetro y radio de un círculo. Por círculo entendemos en este caso el conjunto de puntos *sobre la superficie de la esfera*, que se encuentran a distancia constante (radio) de un punto (centro), donde la distancia se mide *a lo largo de un segmento de círculo máximo*. Dado que todos los puntos sobre la esfera son equivalentes, podemos orientar las coordenadas polares de manera que el eje polar pase por el centro del círculo. Un círculo queda entonces definido como una curva a θ constante. Consideremos el círculo definido por la ecuación

$$\theta = \Theta \quad (5.11)$$

El perímetro P de este círculo es la longitud de dicha curva, a lo largo de la cual tenemos $d\theta = 0$. De la Ec.(5.10) tenemos

$$P = \oint dS = \int_0^{2\pi} a \sin \Theta d\phi = 2\pi a \sin \Theta \quad (5.12)$$

El radio r del círculo es la distancia de cualquier punto sobre la curva al polo norte, medida a lo largo de un meridiano lo cual implica $\phi = \text{constante}$, es decir $d\phi = 0$ y $dS = a d\theta$. Así,

$$r = \int_0^{\Theta} a d\theta = a \Theta$$

y por lo tanto

$$P = 2\pi a \sin \left(\frac{r}{a} \right), \quad (5.13)$$

de donde recuperamos la expresión (5.1).

Proyecciones de la esfera

La geometría esférica describe con muy buena aproximación la superficie terrestre. Para trazar un mapa de la superficie terrestre (planisferio terrestre o mapamundi), tenemos que proyectar la superficie de la esfera en un plano. Esta proyección no es única y las diferentes opciones constituyen un ejemplo de una misma geometría expresada en diferentes sistemas de coordenadas.

En coordenadas polares la geometría esta dada por el elemento de línea (5.10) siendo a el radio de la tierra. Usualmente al ángulo ϕ se lo denomina *longitud*. La latitud es $\lambda = \pi/2 - \theta$. En términos de latitud y longitud el elemento de línea es

$$dS^2 = a^2(d\lambda^2 + \cos^2 \lambda d\phi^2) \quad (5.14)$$

Para construir un mapa debemos introducir nuevas coordenadas x e y sobre la esfera, definidas a través de relaciones del tipo

$$x = x(\lambda, \phi) \quad y = y(\lambda, \phi)$$

y utilizar estas variables como coordenadas cartesianas en el plano para trazar los contornos de continentes, ubicación de ciudades, etc..

Es claro que existe un número infinito de proyecciones. El ejemplo mas simple es una proyección lineal:

$$x = \frac{L_x \phi}{2\pi} \quad y = \frac{L_y \lambda}{\pi} \quad (5.15)$$

donde (L_x, L_y) son las dimensiones del mapa. Esta transformación simplemente expresa latitud y longitud en un gráfico cartesiano, reescalado las variables al tamaño del mapa. El resultado, que se conoce como proyección equirectangular, se muestra en la Fig.5.2a. Es claro que esta proyección deforma las distancias reales, especialmente en la región de los polos. De hecho, toda proyección de la esfera en el plano deforma en alguna medida las distancias. Existen otras proyecciones mas útiles que preservan algunas propiedades de la geometría de la esfera en el plano. Por supuesto, no todas las propiedades se pueden preservar, ya que la geometría de la esfera es diferente de la del plano.

Una clase muy amplia y utilizada de proyecciones mantienen la linealidad en la longitud y proyectan no-linealmente la latitud:

$$x = \frac{L\phi}{2\pi} \quad y = y(\lambda) \quad (5.16)$$

Para proyecciones de este tipo, el elemento de línea en la esfera toma la forma

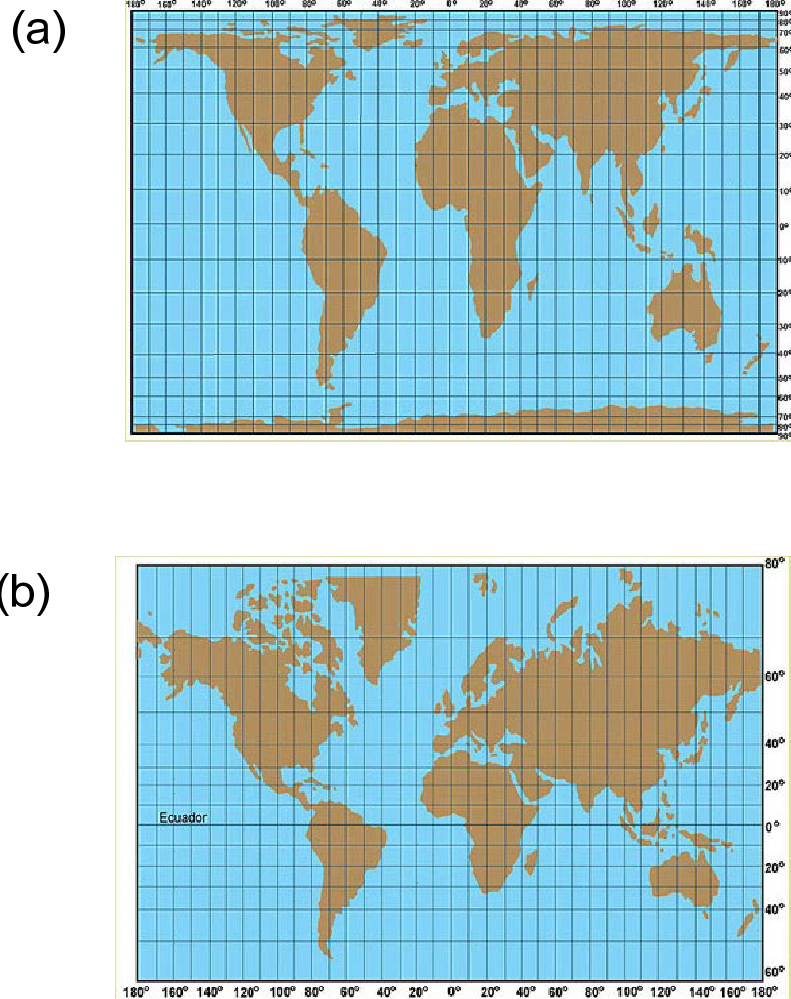


FIGURE 5.2: Proyecciones de la superficie terrestre en el plano (mapamundi). a) Proyección equirectangular. b) Proyección Mercator.

5.2. GEOMETRIAS NO EUCLIDIANAS

$$dS^2 = a^2 \left[\left(\frac{2\pi}{L} \cos \lambda(y) \right)^2 dx^2 + \left(\frac{d\lambda}{dy} \right)^2 dy^2 \right] \quad (5.17)$$

Un ejemplo simple de este tipo de proyección (y de hecho uno de los más familiares) es la llamada proyección Mercator, inventada por G. Kremer en 1569 y la cual se muestra en la Fig.5.2b. Esta proyección tiene la particularidad de que preserva el ángulo entre dos direcciones a partir de cualquier punto. La misma fue inventada para facilitar la navegación marítima. Si un marinero desea navegar desde Buenos Aires a Johannesburg, traza una línea recta en el mapa uniendo las dos ciudades. Midiendo el ángulo en el mapa de esta línea respecto del eje y , sabe cual debe ser el ángulo a mantener por la dirección de navegación respecto del norte geográfico.

Como podemos elegir la transformación $y = y(\lambda)$ para preservar los ángulos? Recordemos que los ángulos, en cualquier geometría, pueden definirse como cocientes entre longitudes, es decir, entre un arco de círculo y su radio para radios suficientemente pequeños (esto es, en el límite del radio tendiendo a cero). El ángulo entre dos direcciones en la esfera será por lo tanto igual al ángulo entre las direcciones correspondientes en el plano si el elemento de línea en la esfera es proporcional al elemento de línea en el plano $dS_{plano}^2 = dx^2 + dy^2$. Así, podemos buscar $y = y(\lambda)$ tal que la Ec.(5.17) pueda ser expresada como

$$dS^2 = \Omega^2(x, y) (dx^2 + dy^2) \quad (5.18)$$

Comparando con la Ec.(5.17) obtenemos la ecuación diferencial

$$\frac{d\lambda}{dy} = \frac{2\pi}{L} \cos \lambda. \quad (5.19)$$

Eligiendo $y = 0$ para $\lambda = 0$ obtenemos la solución

$$y(\lambda) = \frac{L}{2\pi} \int_0^\lambda \frac{d\lambda'}{\cos \lambda'} = \frac{L}{2\pi} \log \left[\tan \left(\frac{\pi}{4} + \frac{\lambda}{2} \right) \right] \quad (5.20)$$

Las Ecs.(5.16) y (5.20) definen la proyección Mercator. El ecuador es mapeado en la línea $y = 0$ y los polos $\lambda = \pm\pi/2$ se mapean en $y = \pm\infty$ respectivamente.

El factor de escala de la Ec.(5.18) resulta entonces (luego de un poco de tratamiento algebraico)

$$\Omega(y) = \frac{2\pi a}{L} \cos \lambda(y) = \frac{4\pi a}{L} \frac{e^{2\pi y/L}}{1 + e^{4\pi y/L}} \quad (5.21)$$

Todas las propiedades importantes de la proyección Mercator pueden deducirse de este factor de escala. Por ejemplo, la distancia real entre dos puntos



FIGURE 5.3: Comparación entre las proyecciones cartográficas de Mercator (que preserva ángulos) y Gall-Peters (que preserva áreas).

en el mapa a una distancia Δx en un mismo paralelo (latitud constante y) viene dada por

$$\Delta S = \Omega(y) \Delta x$$

El factor de escala tiende a cero cuando nos aproximamos de los polos $y \rightarrow \pm\infty$. Así, distancias horizontales iguales en el mapa, entre puntos ubicados a diferentes latitudes, corresponden a distancias reales cada vez menores cuanto mas cerca estemos de los polos. De la misma manera, un elemento de area $dx dy$ en el mapa corresponde a un elemento de area en la esfera $dA = \Omega^2(y) dx dy$. Así, las áreas en el mapa resultan magnificadas respecto del area real en las cercanías de los polos. Esto puede apreciarse en la comparación entre la proyección Mercator y la proyección Gall-Peters (esta última preserva las areas) que se muestra en la Fig.5.3. El ejemplo mas notable es Groenlandia, que en la proyección Mercator aparenta tener un area equivalente a Sudamerica, siendo que en la realidad es mucho menor.

5.2.3 Coordenadas e invariancia

Resumiendo los resultados de las secciones anteriores, una geometría arbitraria puede definirse a través de un elemento de línea, que nos da la distancia entre puntos infinitesimalmente cercanos. Sin pérdida de generalidad, supongamos trabajemos en tres dimensiones. Para un sistema de coordenadas arbitrario (x^1, x^2, x^3) , el elemento de línea puede escribirse como una forma cuadrática

$$dS^2 = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 g_{ij} dx^i dx^j \quad (5.22)$$

donde los coeficientes $g_{ij} = g_{ji}$ son funciones de las coordenadas y son las componentes del llamado *tensor métrico*, o simplemente *métrica*. En coordenadas cartesianas $g_{ij} = \delta_{ij}$ (donde δ_{ij} es una delta de Kroenecker). Si no existe una transformación de coordenadas que nos lleve la métrica a esta forma, entonces la geometría es no euclidiana.

Un buen sistema de coordenadas nos provee de una identificación única de cada punto en el espacio. No obstante, la mayoría de los sistemas de coordenadas fallan al respecto en alguna parte del espacio. Por ejemplo, en coordenadas polares (r, θ, ϕ) , los puntos sobre el eje polar ($\theta = 0$) son etiquetados por un conjunto infinito de valores de coordenadas (para cada valor de r el valor de ϕ es arbitrario). Este es un ejemplo de singularidad coordenada. Un ejemplo mas dramático es el siguiente. Tomemos el elemento de línea en el plano en coordenadas polares

$$dS^2 = dr^2 + r^2 d\phi^2$$

y efectuemos la transformación $r = a/r'$, para algún valor constante a . El resultado es

$$dS^2 = \frac{a^4}{r'^4} (dr'^2 + r'^2 d\phi^2)$$

Este elemento de línea explota en $r' = 0$. No obstante, físicamente no ocurre nada interesante allí; la geometría continúa siendo la del plano euclideo! La singularidad ocurre simplemente porque la transformación mapea todos los puntos en $r = \infty$ a $r' = 0$ y por lo tanto falla en dar una identificación única de todos los puntos en el plano. Vamos a ver otros ejemplos mas adelante.

Un punto importante a enfatizar es que la distancia entre dos puntos es independiente de la elección del sistema de coordenadas. Cuando calculamos el perímetro de un círculo en coordenadas cartesianas y polares obtuvimos el mismo resultado. Es evidente que esto debe ser así. Si nos dan un disco físico,

podemos verificar mediante una cinta métrica que el contorno es un círculo, si medimos que diferentes puntos del mismo equidistan de un centro. Midiendo además el perímetro del contorno podemos verificar su relación con el radio del mismo. Estas relaciones no tienen nada que ver con ningún sistema de coordenadas. Un sistema de coordenadas es nada más que un modo conveniente de etiquetar los puntos en una geometría. Existe un número infinito de sistemas de coordenadas para una misma geometría, todos equivalentes entre sí. La distancia entre dos puntos dS , es una cantidad invariante ante transformaciones de coordenadas.

5.3 Teoría de la Relatividad Especial

La Teoría de la Relatividad Especial nos brinda un ejemplo de geometría no euclidiana. Repasemos brevemente los postulados y consecuencias principales de la teoría.

El postulado fundamental de la relatividad especial es que todas las leyes de la física adoptan la misma forma en cualquier sistema de referencia inercial (es decir, sistemas que se mueven con velocidad constante unos respecto de otros¹). Esto incluye no solo las leyes de la mecánica (principio que ya se encontraba en la mecánica newtoniana), sino también las del electromagnetismo. Lo último implica que la velocidad de la luz debe ser la misma en cualquier referencial inercial (hecho empírico soportado por el famoso experimento de Michelson-Morley).

La constancia de la velocidad de la luz en diferentes referenciales inerciales tienen enormes implicancias, siendo la primera y tal vez más importante la relatividad de la simultaneidad. Esto es, eventos simultáneos en un referencial inercial no lo son en otro. La idea de tiempo absoluto, independiente del sistema inercial de la mecánica newtoniana, debe ser por lo tanto abandonada. Así, la noción de tiempo depende del referencial, el cual se encuentra caracterizado no solo por sus coordenadas espaciales x, y, z , sino también por una cuarta coordenada t (el tiempo en ese referencial) y un referencial diferente está caracterizado por un conjunto diferente de coordenadas (x', y', z', t') . El tiempo absoluto, independiente del espacio tridimensional pierde sentido y es necesario estudiar los eventos físicos en una unificación cuatri-dimensional de espacio y tiempo, denominado espacio-tiempo. La separación del espacio-tiempo en nociones separadas de espacio y tiempo ocurre de manera diferente en cada sistema inercial. Las transformaciones de coordenadas entre diferentes sistemas

¹Por supuesto, esto incluye también sistemas estacionarios que se encuentran orientados de manera diferente.

5.3. TEORÍA DE LA RELATIVIDAD ESPECIAL

inerciales que preservan la velocidad de la luz se denominan *Lorentz boost* y en conjunto con las traslaciones y rotaciones rígidas de coordenadas constituyen las llamadas *transformaciones de Lorentz*. Para un sistema de coordenadas (x', y', z', t') en un referencial que se mueve con velocidad v en la dirección x respecto de un referencial con coordenadas (x, y, z, t) estas transformaciones adoptan la forma

$$t' = \gamma(t - vx/c^2) \quad (5.23)$$

$$x' = \gamma(x - vt) \quad (5.24)$$

$$y' = y \quad (5.25)$$

$$z' = z \quad (5.26)$$

donde

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (5.27)$$

La transformación inversa se obtiene simplemente cambiando $v \rightarrow -v$ en las expresiones anteriores. A partir de estas expresiones la ley de transformación para las velocidades es inmediata. Si $\vec{V} = d\vec{x}/dt$ es la velocidad de una partícula en el referencial en reposo, su velocidad $\vec{V}' = d\vec{x}'/dt'$ en el referencial que se mueve con velocidad v en la dirección x es

$$V'^x = \frac{V^x - v}{1 - vV^x/c^2} \quad (5.28)$$

$$V'^y = \frac{1}{\gamma} \frac{V^y}{1 - vV^x/c^2} \quad (5.29)$$

$$V'^z = \frac{1}{\gamma} \frac{V^z}{1 - vV^x/c^2} \quad (5.30)$$

De aquí resulta inmediato verificar que, si un objeto se mueve con con velocidad c en un referencial, su velocidad en cualquier otro referencial es siempre c .

Espacio-tiempo

Un punto en el espacio-tiempo define un *evento*, esto es, algo que ocurre en un lugar particular en un tiempo particular. La curva en el espacio-tiempo asociada a la trayectoria de una partícula se denomina *línea de mundo*.

Los postulados de la relatividad requieren que las leyes de la física sean expresables en términos de cantidades que sean independientes del sistema de

referencia. Una cantidad fundamental en este sentido es la *distancia* entre dos eventos. El elemento de línea

$$ds^2 = -(cdt)^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (5.31)$$

constituye una cantidad invariante ante transformaciones de Lorentz. Esto es, de las Ecs.(8.32)-(8.34) es fácil ver que

$$-(cdt')^2 + dx'^2 + dy'^2 + dz'^2 = -(cdt)^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2$$

La Relatividad Especial nos define de esta manera, a través del elemento de línea (5.31), una geometría del espacio-tiempo cuadri-dimensional. Esta geometría es no euclidiana (debido al signo menos). Sin embargo, este espacio es también plano, en un sentido que quedará claro más adelante². Dos eventos pueden estar separados por una distancia cuyo cuadrado es positivo, negativo o nulo. Si la distancia entre dos eventos es $ds^2 > 0$ se dice que tienen una separación *tipo espacial*; este es el caso, por ejemplo, de dos eventos para los cuales $dt = 0$, en cuyo caso ds se reduce a la distancia euclídea tridimensional. Si la distancia entre dos eventos es $ds^2 < 0$ se dice que tienen una separación *tipo temporal*; este es el caso, por ejemplo, de dos eventos que ocurren en el mismo lugar $dx = dy = dz = 0$. Si $ds^2 = 0$ se dice que los eventos tienen una separación nula, por ejemplo si $dy = dz = 0$ y $dx = cdt$. Puntos con separación nula pueden estar conectados por rayos de luz que viajan a la velocidad c . El conjunto de puntos con separación nula de un punto P definen su *cono de luz*. Partículas con masa en reposo no nula se mueven por líneas de mundo tipo temporal, las cuales se encuentran siempre dentro del cono de luz en cualquier punto de la trayectoria, ya que su velocidad debe ser inferior a la de la luz. De esta manera, los conos de luz definen relaciones causales entre puntos en el espacio-tiempo. Un evento en un punto P solo puede influenciar o ser influenciado por puntos que yacen dentro o sobre su cono de luz.

Supongamos un sistema de referencia solidario con una partícula a lo largo de su línea de mundo. Para medir la distancia entre eventos en este referencial es conveniente introducir

$$d\tau^2 = -ds^2/c^2 \quad (5.32)$$

que es real y tiene dimensiones de tiempo. Un reloj fijo a este sistema de referencia mide el tiempo τ , el cual por lo tanto se denomina *tiempo propio*. El

²En particular, una partícula libre en este espacio sigue una trayectoria recta, al igual que en la geometría euclídea de la física newtoniana

5.3. TEORÍA DE LA RELATIVIDAD ESPECIAL

tiempo propio entre dos puntos A y B en una línea de mundo tipo temporal resulta

$$\begin{aligned}\tau_{AB} &= \int_A^B d\tau = \int_A^B [dt^2 - (dx^2 + dy^2 + dz^2)/c^2]^{1/2} \\ &= \int_{t_A}^{t_B} dt \left\{ 1 - \frac{1}{c^2} \left[\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dz}{dt} \right)^2 \right] \right\}^{1/2}\end{aligned}\quad (5.33)$$

o de manera mas compacta

$$\tau_{AB} = \int_{t_A}^{t_B} dt \sqrt{1 - V^2(t)/c^2} \quad (5.34)$$

El tiempo propio τ_{AB} es siempre mas corto que el intervalo $t_B - t_A$. Esto es lo que se conoce como el fenómeno de *dilatación temporal* y tiene como su expresión mas famosa la llamada "paradoja de los gemelos". Dos gemelos, Andrea y Bernardo se encuentran en reposo en un referencial al tiempo t_1 en una posición x_P . Andrea parte en una nave en la dirección x , acelerándose y frenándose hasta un cierto punto a partir del cual retorna a la posición inicial x_P , deteniéndose al tiempo t_2 (ver figura 5.4). Bernardo permanece en x_P durante todo el intervalo $t_2 - t_1$. El tiempo transcurrido para Andrea es menor que $t_2 - t_1$ por la Ec.(5.34). La gemela que se movió envejeció menos que el que se quedó quieto³. La paradoja de los gemelos ilustra una propiedad importante del espacio-tiempo plano. Cualquier trayectoria seguida por Andrea tendrá una distancia (tiempo propio) menor que la línea recta seguida por Bernardo⁴. La línea recta es la curva de distancia *máxima* entre todas las líneas de mundo tipo temporal que conectan dos puntos.

Al trabajar en el espacio-tiempo resulta conveniente utilizar cuadvectores, tal como el vector desplazamiento entre dos puntos $\Delta \mathbf{x} = (\Delta t, \Delta x, \Delta y, \Delta z)$. Dado un sistema de coordenadas (t, x, y, z) en un referencial inercial y un cuadvector \mathbf{a} , lo denotaremos en general por a^α (el conjunto de componentes a^α) y a sus componentes indistintamente como $a^\alpha = (a^t, a^x, a^y, a^z) =$

³La supuesta paradoja proviene de la aparente simetría entre las situaciones de ambos gemelos. Desde su punto de vista, Andrea permanece en reposo, viendo a Bernardo alejarse y volver a su posición. Sin embargo las situaciones no son simétricas. Ambos gemelos se mueven por líneas de mundo diferentes que conectan los mismos puntos inicial y final, y por lo tanto sus tiempos propios son diferentes. Uno permanece en un referencial inercial y el otro se acelera.

⁴Las líneas en diagrama (x, ct) parecen tener longitud mayor que las de la línea recta, pero esto es porque estamos representando el espacio-tiempo (que es no euclidiano) en un espacio euclideo. La situación es análoga a la de las distancias en un mapamundi.

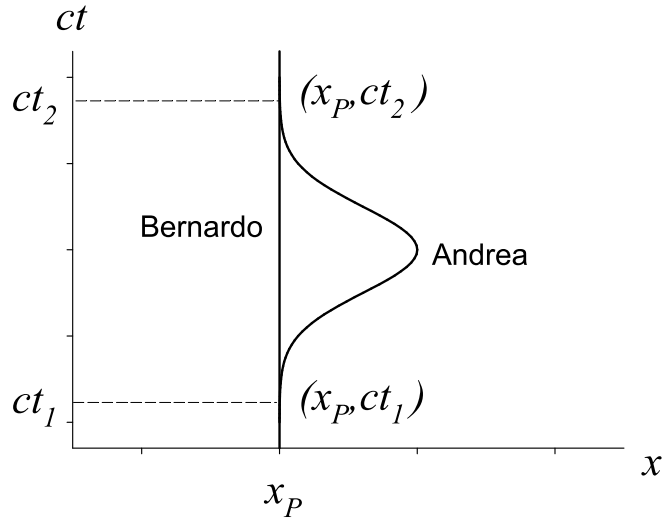


FIGURE 5.4: Paradoja de los gemelos. Andrea y Bernardo siguen dos líneas de mundo diferentes entre dos puntos en el espacio-tiempo. Las longitudes de dichas trayectorias son diferentes y consecuentemente el tiempo propio registrado por sus relojes son diferentes.

$(a^0, a^1, a^2, a^3) = (a^t, \vec{a})$, reservando la notación de flechas para vectores en el espacio euclideo tridimensional. Dados dos referenciales inerciales que se mueven con velocidad constante v uno respecto de otro, las componentes de un cuadrivector en ambos sistemas de coordenadas se relacionan a través de las transformaciones de Lorentz (8.32)-(8.34). El producto escalar entre dos cuadrivectores viene dado por

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \eta_{\alpha\beta} a^\alpha b^\beta \quad (5.35)$$

donde la matriz (o tensor)

$$\eta_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} -c^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.36)$$

5.3. TEORÍA DE LA RELATIVIDAD ESPECIAL

se conoce como métrica del espacio-tiempo plano ó métrica de Minkowski. El producto escalar (5.35) es invariante ante las transformaciones de Lorentz.

Dinámica relativista

Una línea de mundo puede describirse dando las tres coordenadas espaciales en función del tiempo t en un dado referencial inercial. No obstante, resulta mas conveniente describir la trayectoria de manera paramétrica en el espacio-tiempo. Esto es, dando las cuatro coordenadas de la partícula x^α en función de un parámetro σ a lo largo de la trayectoria. Una parametrización natural es utilizar la propia longitud de la curva, esto es, el tiempo propio τ . Así, la línea de mundo se describe a través de las ecuaciones

$$x^\alpha = x^\alpha(\tau)$$

La cuadrivelocidad es el cuadvectores \mathbf{u} cuyas componentes son las derivadas de la posición a lo largo de la línea de mundo respecto del tiempo propio

$$u^\alpha = \frac{dx^\alpha}{d\tau} \quad (5.37)$$

El cuadvectores \mathbf{u} es tangente a la línea de mundo, ya que el desplazamiento a lo largo de la curva viene dado por $\Delta x^\alpha = u^\alpha \Delta\tau$.

Las componentes de \mathbf{u} pueden expresarse en términos de la trivelocidad $\vec{V} = d\vec{x}/dt$ en un referencial inercial particular usando la versión diferencial de la Ec.(5.34)

$$d\tau = dt\sqrt{1 - V^2(t)/c^2}. \quad (5.38)$$

Por ejemplo,

$$u^t = \frac{dt}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{1 - V^2/c^2}} \quad (5.39)$$

Abusando de la abreviatura $\gamma = (1 - V^2/c^2)^{-1/2}$ (no confundir con el γ de las transformaciones de Lorentz!) tenemos

$$u^\alpha = (\gamma, \gamma\vec{V}). \quad (5.40)$$

Una consecuencia inmediata de este resultado es la normalización de la cuadrivelocidad

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = -c^2 \quad (5.41)$$

La primera ley de Newton se asume válida también en la Relatividad Especial: en ausencia de fuerzas, un cuerpo permanece en reposo o se mueve en una trayectoria recta con velocidad constante. Esto se resume en la expresión

$$\frac{d\mathbf{u}}{d\tau} = 0 \quad (5.42)$$

la cual de la Ec.(5.40) implica que \vec{V} es constante en cualquier referencial.

El cuádrimomento se define como

$$\mathbf{p} = m\mathbf{u} \quad (5.43)$$

donde m es la masa en reposo de la partícula. De la Ec.(5.41) el cuádrimomento satisface la normalización

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = -m^2 c^2 \quad (5.44)$$

y la ecuación de movimiento (5.42)

$$\frac{d\mathbf{p}}{d\tau} = 0 \quad (5.45)$$

La expresión anterior nos dice que las componentes \mathbf{p} son cantidades conservadas para una partícula libre. Por otra parte, de la Ec.(5.40) las componentes de \mathbf{p} se relacionan con la velocidad \vec{V} en un referencial inercial a través de

$$p^t = \frac{m}{\sqrt{1 - V^2/c^2}}, \quad \vec{p} = \frac{m\vec{V}}{\sqrt{1 - V^2/c^2}};$$

en el límite newtoniano $V/c \ll 1$ tenemos

$$p^t = m + \frac{1}{2}mV^2/c^2 + \dots, \quad \vec{p} = m\vec{V} + \dots$$

Así, a bajas velocidades \vec{p} se reduce al momento usual, mientras que $p^t c^2$ resulta la energía cinética más una constante. La energía relativista se asume entonces que es $E = p^t c^2$ y a \mathbf{p} se lo denomina el cuádrivector energía-momento

$$p^\alpha = (E/c^2, \vec{p}) = (m\gamma, m\gamma\vec{V}) \quad (5.46)$$

De la normalización (5.44) resulta la expresión para la energía relativista

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 p^2} \quad (5.47)$$

Para $p = 0$ se obtiene la probablemente más famosa fórmula de la física $E = mc^2$.

Principio variacional para el movimiento de una partícula libre

Hemos visto que el tiempo propio entre dos puntos del espacio-tiempo es máximo en una trayectoria de velocidad constante. Esto nos permite obtener la ecuación de movimiento para partículas libres en términos variacionales, principio que generalizaremos luego a la relatividad general. El principio variacional puede formularse como sigue: *la línea de mundo para una partícula libre entre dos puntos con separación tipo temporal corresponde a un extremo del tiempo propio entre ellos.* Esto es análogo al principio de máxima acción en la formulación Lagrangiana de la mecánica clásica, usando como integral de acción el tiempo propio.

Supongamos que parametrizamos la línea de mundo con un parámetro σ que toma los valores 0 y 1 en los puntos inicial y final de la trayectoria. El tiempo propio resulta entonces

$$\tau = \int_0^1 d\sigma \left\{ \left(\frac{dt}{d\sigma} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left[\left(\frac{dx}{d\sigma} \right)^2 + \left(\frac{dy}{d\sigma} \right)^2 + \left(\frac{dz}{d\sigma} \right)^2 \right] \right\}^{1/2} \quad (5.48)$$

que corresponde a un Lagrangiano

$$L = \left\{ \left(\frac{dt}{d\sigma} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left[\left(\frac{dx}{d\sigma} \right)^2 + \left(\frac{dy}{d\sigma} \right)^2 + \left(\frac{dz}{d\sigma} \right)^2 \right] \right\}^{1/2} = \frac{1}{c} \left[-\eta_{\alpha\beta} \frac{dx^\alpha}{d\sigma} \frac{dx^\beta}{d\sigma} \right]^{1/2} \quad (5.49)$$

La condición de extremo se obtiene aplicando las ecuaciones de Euler-Lagrange

$$-\frac{d}{d\sigma} \left(\frac{\partial L}{\partial (dx^\alpha/d\sigma)} \right) + \frac{\partial L}{\partial x^\alpha} = 0 \quad (5.50)$$

Escribamos por ejemplo la ecuación para $x^1 \equiv x$:

$$\frac{d}{d\sigma} \left[\frac{1}{L} \frac{dx^1}{d\sigma} \right] = 0$$

Dado que $L = d\tau/d\sigma$, resulta inmediato que

$$\frac{du^1}{d\tau} = 0$$

y lo mismo para las restantes coordenadas.

5.4 Teoría geométrica de la gravedad

5.4.1 Teoría de la gravedad de Newton

La teoría newtoniana de la gravedad se basa en el concepto de fuerza entre masas puntuales. La misma especifica la fuerza \vec{F} gravitatoria que una masa puntual A de masa M ejerce sobre otra masa puntual B de masa m situada a una distancia r de la primera. Esta fuerza es atractiva, dirigida a lo largo de la dirección que une las masas e inversamente proporcional a r^2 :

$$\vec{F}_{grav} = -\frac{GmM}{r^2} \vec{e}_r \quad (5.51)$$

donde \vec{e}_r es un vector unitario que apunta en la dirección que une las masas y $G = 6.67 \times 10^{-11} \text{ Nm}^2/\text{Kg}^2$ es la constante de gravitación universal. Esta fuerza sobre la masa B puede ser escrita como

$$\vec{F}_{grav} = -m\nabla\Phi(\vec{x}_B) \quad (5.52)$$

donde \vec{x}_B es la posición de la masa B y $\Phi(\vec{x})$ es el potencial gravitacional producido por A:

$$\Phi(\vec{x}) = -\frac{GM}{r} = -\frac{GM}{|\vec{x} - \vec{x}_A|}.$$

Si B es atraída por un conjunto de masa puntuales M_j , $j = 1, 2, \dots$ en diferentes posiciones \vec{x}_j el potencial viene dado por

$$\Phi(\vec{x}) = -\sum_j \frac{GM_j}{|\vec{x} - \vec{x}_j|};$$

para una distribución continua de masa con densidad $\mu(\vec{x})$ tenemos

$$\Phi(\vec{x}) = -\int d^3x' \frac{G\mu(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|};$$

La forma diferencial para la ecuación anterior es la ecuación de Poisson para el potencial gravitatorio

$$\nabla^2\Phi(\vec{x}) = 4\pi G\mu(\vec{x}) \quad (5.53)$$

Si insertamos ahora la Ec.(5.52) en la ecuación de movimiento de Newton $\vec{F} = m\vec{a}$ obtenemos:

$$m\vec{a} = -m\nabla\Phi \quad (5.54)$$

5.4. TEORÍA GEOMÉTRICA DE LA GRAVEDAD

o bien

$$\vec{a} = -\nabla\Phi.$$

La expresión anterior es la ley de caída de los cuerpos de Galileo, es decir, que todos los cuerpos caen con la misma aceleración en un campo gravitatorio, independientemente de su masa o composición. La clave de este comportamiento universal radica en el doble rol jugado por la masa en la Ec.(5.54). La masa que aparece en el lado izquierdo de la ecuación gobierna las propiedades inerciales de la partícula, es decir, como responde ante una fuerza externa *de cualquier naturaleza* (gravitatoria, electromagnética, elástica, etc.). Vamos a llamarla *masa inercial* m_I , es decir, vamos a reescribir

$$\vec{F} = m_I \vec{a}$$

La masa que aparece en el lado derecho de la Ec.(5.54) mide la intensidad de la fuerza gravitacional entre los cuerpos. Vamos a denominarla *masa gravitacional* m_G . Esta masa es la que aparece en la ley de gravitación de Newton

$$\vec{F}_{grav} = -\frac{Gm_G M_G}{r^2} \vec{e}_r \quad (5.55)$$

o bien

$$\vec{F} = -m_G \nabla\Phi(\vec{x}) \quad (5.56)$$

Experimentalmente se encuentra que todos los cuerpos caen con la misma aceleración en un campo gravitacional. Esto implica que el cociente m_G/m_I es el mismo para todos los cuerpos, es decir, una constante universal. Convencionalmente se eligen las unidades de manera que dicha constante sea igual a uno. Así, tenemos que

$$m_I = m_G \quad (5.57)$$

Esta igualdad entre masa inercial y gravitatoria es altamente no trivial y uno de los principios de la física mejor verificados experimentalmente (con un error relativo inferior a 10^{-13}). Tenemos dos cantidades que a priori no tienen porque estar relacionadas y desde la teoría newtoniana esta igualdad no tiene explicación. Sin embargo, es en este hecho experimental en que yace la clave para una teoría geométrica de la gravedad: si todos los cuerpos que parten de una misma condición inicial, independientemente de su composición se mueven a lo largo de la misma trayectoria, es razonable suponer que dicha curva es una propiedad del espacio-tiempo, independiente del cuerpo que la transita.

5.4.2 El Principio de Equivalencia

La idea anterior se refuerza con la siguiente observación (devida por supuesto a A. Einstein): un observador en caída libre⁵ no siente su propio peso. En términos un poco más precisos, en un sistema de referencia no inercial en caída libre, en una vecindad suficientemente pequeña del espacio-tiempo, el campo gravitatorio desaparece y las leyes de la física obedecen la relatividad especial. Pensemos en los astronautas en una estación espacial que orbita la tierra o en paracaidistas antes de abrir el paracaídas. Si cualquiera de estos observadores (en un entorno local suficientemente pequeño) suelta un objeto, verá que el mismo permanece en reposo o mantiene un movimiento uniforme. De un estudio del movimiento de diferentes objetos en un período relativamente corto de tiempo, los observadores no serán capaces de distinguir si se encuentran en caída libre en el campo gravitacional terrestre o en reposo (movimiento uniforme) en el espacio vacío, alejados de cualquier fuente gravitacional. La igualdad entre masa inercial y gravitatoria es fundamental para alcanzar esta conclusión. Si una bola de acero y una pluma cayeran con diferentes aceleraciones en el campo gravitatorio terrestre, no podrían permanecer en movimiento uniforme uno respecto del otro dentro de la estación espacial. La detección de cualquier diferencia en las aceleraciones, por pequeña que sea, sería suficiente para distinguir la presencia de un campo gravitacional.

La igualdad entre masas inercial y gravitatoria no solo implica que el campo gravitacional puede ser eliminado en un referencial en caída libre; el campo gravitacional también puede ser *creado* mediante aceleración. Consideremos observadores en un laboratorio aislado del exterior sobre la superficie de un planeta con gravedad g (Fig.5.5). Supongamos que el laboratorio es suficientemente pequeño como para que el campo gravitacional pueda ser considerado uniforme dentro de la resolución experimental de los observadores. Los observadores pueden llevar a cabo distintos tipos de experimentos, arrojando objetos de diferentes masas y verificarán que todos los cuerpos caen con la misma aceleración g , debido a la equivalencia entre masas inercial y gravitatoria. Consideremos ahora el mismo laboratorio en el espacio vacío, lejos de cualquier fuente gravitacional, pero acelerado hacia arriba con aceleración $a = g$ (Fig.5.5). Si los observadores llevan a cabo ahora los mismos experimentos de antes, obtendrán exactamente los mismos resultados: todos los cuerpos caen "hacia abajo" con la misma aceleración g . Es decir, mediante estos experimentos mecánicos, es imposible discernir si el laboratorio se encuentra en presencia de

⁵Llamamos caída libre al movimiento de un cuerpo bajo acción exclusiva del campo gravitatorio, es decir, despreciando todo otro tipo de fuerzas, tales como el rozamiento con el aire o cualquier otro fluido.

5.4. TEORÍA GEOMÉTRICA DE LA GRAVEDAD

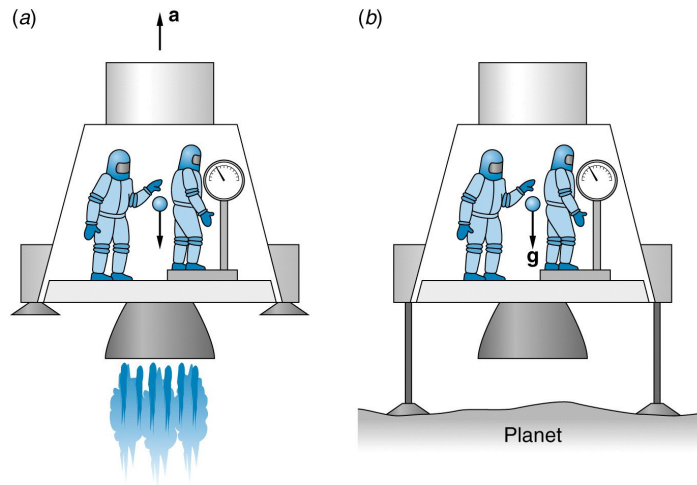


FIGURE 5.5: . Observadores en un referencial local acelerado con aceleración $a = g$ hacia arriba (a) y en un referencial en reposo bajo la acción de un campo gravitatorio uniforme g son incapaces de distinguir entre ambas situaciones mediante experimentos mecánicos.

un campo gravitacional o está uniformemente acelerado. Ambas situaciones son enteramente equivalentes, en lo que respecta a este tipo de experimentos.

Que ocurre con otro tipo de experimentos, por ejemplo, con campos electromagnéticos? La propuesta de Einstein se resume en lo que se conoce como **Principio de Equivalencia**: *no existe ningún tipo de experimento capaz de distinguir entre aceleración uniforme y un campo gravitatorio uniforme.*

Las implicancias de este principio son enormes. Por ejemplo, si el mismo se cumple para los fenómenos electromagnéticos, nos lleva a concluir que la luz cae en un campo gravitatorio con la misma aceleración que los cuerpos materiales. En un referencial inercial un rayo de luz se mueve siguiendo una trayectoria recta. Supongamos un laboratorio acelerado en la dirección perpendicular al rayo de luz con aceleración a (Fig.5.6). Desde el referencial acelerado veremos que el rayo de luz incide en la pared opuesta a la cual penetró en una posición inferior (respecto a la dirección de desplazamiento) y por lo tanto en este referencial vemos que el rayo sigue una trayectoria curva. Por el principio de equivalencia, en un referencial en reposo bajo la acción de un campo gravitatorio a el rayo de

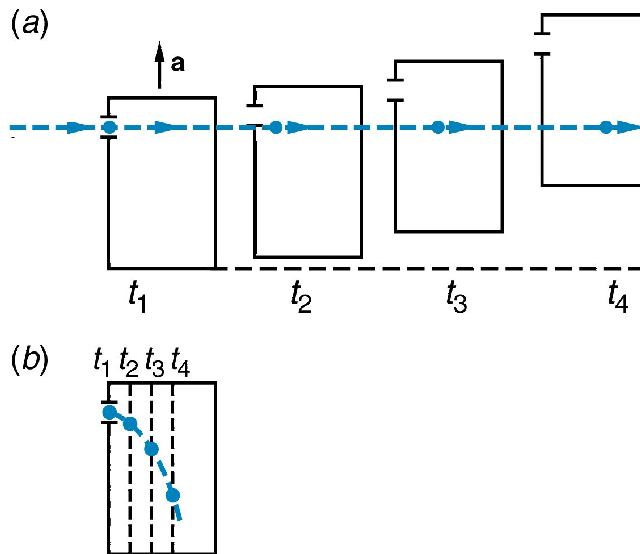


FIGURE 5.6: . (a) Un rayo de luz que se propaga en la dirección x sigue una línea recta en un referencial en reposo y penetra por una ventana a un ascensor que sube con aceleración a . (b) El mismo rayo de luz visto desde el referencial acelerado.

luz debe seguir la misma trayectoria. El desvío de la luz en presencia de campos gravitatorios fuertes se ha verificado experimentalmente.

Analicemos ahora el experimento pensado que se ilustra en la Fig.5.7. La observadora A (Andrea) se encuentra a una altura h del observador B (Bernardo) en un referencial en reposo bajo la acción de un campo gravitatorio, en el cual todos los cuerpos caen con aceleración g . Pensemos que Andrea se encuentra en la punta de un cohete de altura h sobre la superficie de la tierra y Bernardo en la base. Andrea le envía a Bernardo pulsos de luz a intervalos regulares de tiempo $\Delta\tau_A$, medidos en un reloj localizado a la misma altura. Bernardo tiene un reloj idéntico, con el cual mide el intervalo de tiempo $\Delta\tau_B$ entre el arribo de dos pulsos sucesivos a su posición. El principio de equivalencia nos dice que $\Delta\tau_B < \Delta\tau_A$. Para ver esto supongamos ahora que el cohete se encuentra acelerado hacia arriba con aceleración g y lejos de cualquier fuente gravitacional. Por el principio de equivalencia las mediciones tienen que ser idénticas que en el caso anterior. Dado que el cohete está acelerado, B recibe los pulsos a una frecuencia mayor de la que son emitidos y lo mismo debe observarse en el cohete en reposo en el campo

5.4. TEORÍA GEOMÉTRICA DE LA GRAVEDAD

gravitatorio.

Para poner esto en términos cuantitativos, analicemos el caso en que el cohete se acelera respecto de un referencial inercial en el cual $V/c \ll 1$, de manera que la mecánica Newtoniana resulte una buena aproximación y podamos despreciar efectos tales como la contracción de Lorentz y la dilatación temporal⁶. Vamos a asumir además que el cohete no se acelera a velocidades relativistas en el tiempo en que demora un pulso en viajar de la punta a la base del cohete. Esto implica que $gh/c^2 \ll 1$.

Supongamos que el cohete se acelera en la dirección z . La posición de Bernardo en el cohete como función del tiempo esta dada por

$$z_B(t) = \frac{1}{2}gt^2 \quad (5.58)$$

si el origen de z coincide con la posición de Bernardo para $t = 0$. La posición de Andrea en la punta del cohete esta dada por

$$z_A(t) = h + \frac{1}{2}gt^2 \quad (5.59)$$

Consideremos la emisión de dos pulsos sucesivos por Andrea y su recepción por Bernardo. Supongamos que el primer pulso es emitido en $t = 0$ y recibido en $t = t_1$. El segundo pulso es emitido en $t = \Delta\tau_A$ y recibido en $t = t_1 + \Delta\tau_B$. La secuencia de eventos se muestra en la Fig.5.8.

La distancia recorrida por el primer pulso es

$$z_A(0) - z_B(t_1) = ct_1 \quad (5.60)$$

La distancia recorrida por el segundo pulso es

$$z_A(\Delta\tau_A) - z_B(t_1 + \Delta\tau_B) = c(t_1 + \Delta\tau_B - \Delta\tau_A) \quad (5.61)$$

Reemplazando las Ecs.(5.58) y (5.59) en las Ecs.(5.60) y (5.61), y asumiendo que $\Delta\tau_A$ es pequeño (comparado con t_1) de manera que podemos despreciar los términos cuadráticos en $\Delta\tau_A$ y $\Delta\tau_B$, obtenemos

$$h - \frac{1}{2}gt_1^2 = ct_1 \quad (5.62)$$

$$h - \frac{1}{2}gt_1^2 - gt_1\Delta\tau_B = c(t_1 + \Delta\tau_B - \Delta\tau_A) \quad (5.63)$$

⁶El problema puede analizarse dentro de la Relatividad Especial y el resultado es exactamente el mismo (dentro del mismo orden de aproximación); la aproximación newtoniana simplemente permite simplificar el análisis.

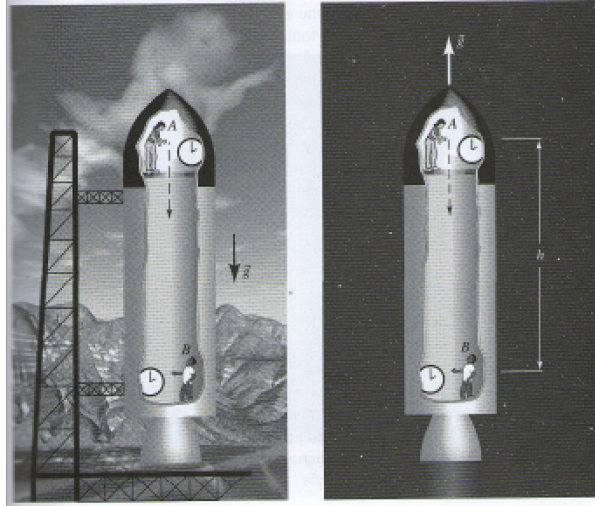


FIGURE 5.7: . Andrea (A) emite señales luminosas desde la punta de un cohete en reposo en un campo gravitacional \vec{g} a intervalos regulares $\Delta\tau_A$. Bernardo (B) en la base del cohete recibe las señales a intervalos $\Delta\tau_B$. Si el cohete se acelera en el vacío con aceleración g los observadores deben medir los mismos tiempos por el principio de equivalencia.

Resolviendo la Ec.(5.62) al menor orden en gh/c^2 obtenemos $t_1 \approx h/c$; restando la Ec.(5.62) de la Ec.(5.63) y reemplazando el valor antes obtenido de t_1 llegamos a

$$\Delta\tau_A = \left(1 + \frac{gh}{c^2}\right) \Delta\tau_B$$

Dado que la frecuencia es $f = 1/\Delta\tau$ y que gh es la diferencia de potencial gravitacional entre A y B: $\Phi_A - \Phi_B = gh$ tenemos finalmente

$$f_B = \left(1 + \frac{\Phi_A - \Phi_B}{c^2}\right) f_A \quad (5.64)$$

Si el receptor se encuentra a a menor potencial que el emisor, recibe la señal a mayor frecuencia de la que es emitida y viceversa. Si bien este resultado fue obtenido para un campo gravitacional uniforme, parece natural asumir

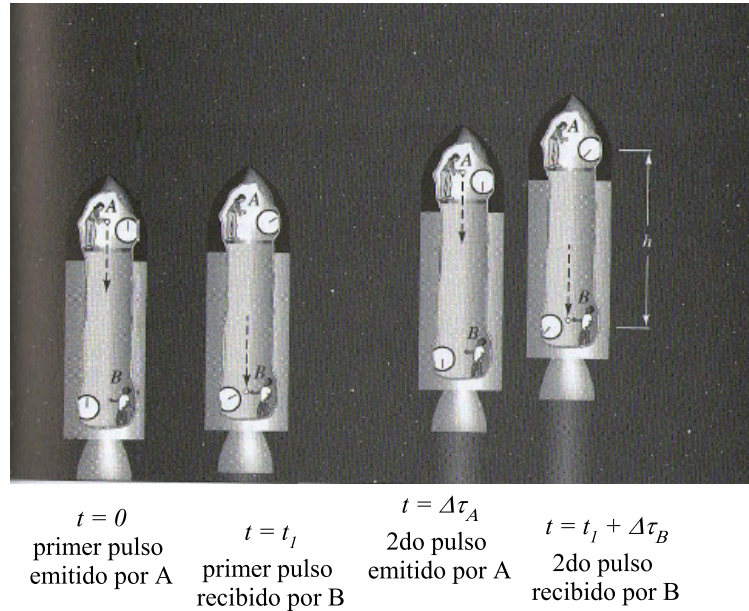


FIGURE 5.8: . Secuencia de eventos en la emisión de pulsos del experimento pensado de la Fig.5.7.

su extensión al caso no uniforme reemplazando simplemente $\Phi_A = \Phi(\vec{x}_A)$ y $\Phi_B = \Phi(\vec{x}_B)$. La validez de esta extensión, así como del principio de equivalencia mismo, reside en última instancia en la verificación experimental. Dos situaciones en las cuales se verifica este fenómeno son el Sistema de Posicionamiento Global (GPS) y el corrimiento al rojo gravitacional.

Corrimiento al rojo gravitacional

Las crestas de una onda luminosa con frecuencia bien definida pueden ser pensadas como una serie de señales emitidas con dicha frecuencia. La relación (5.64) puede ser por lo tanto aplicada a la luz. Por ejemplo, la luz emitida desde la superficie de una estrella con frecuencia ω_* arribará a un observador lejano con una frecuencia ω_∞ menor que ω_* . Esto se conoce como corrimiento al rojo gravitacional. El potencial gravitacional en la superficie de una estrella de masa M y radio R es $\Phi = -GM/R$; el potencial en el infinito es cero. La Ec.(5.64) resulta entonces

$$\omega_{\infty} = \left(1 - \frac{GM}{Rc^2}\right) \omega_*$$
(5.65)

Esta expresión es precisa para valores pequeños de GM/Rc^2 ; una relación general para valores arbitrarios de este cociente se obtiene de la Teoría de la Relatividad General (la cual por supuesto reproduce la anterior en el límite $GM/Rc^2 \ll 1$). El corrimiento a rojo gravitacional predicho por la Ec.(5.65) ha sido detectado en el espectro de enanas blancas (estrellas pequeñas muy densas con una masa comparable a la del sol y un radio $R \sim 10^3$ Km), para las cuales $GM/Rc^2 \sim 10^{-3}$.

GPS

El **GPS** (Global Positioning System) se basa en una constelación de 24 satélites, cada uno en una órbita de 12 hs alrededor de la tierra, distribuidos en 6 planos orbitales equiespaciados. Cada satélite lleva un reloj atómico de alta precisión (con un error relativo del orden de 10^{-13} en unas pocas semanas) que mide el tiempo propio del satélite, con correcciones transmitidas desde tierra periódicamente que permiten mantener la precisión por períodos prolongados. Los detalles de operación son altamente complejos, pero podemos tener una idea de su funcionamiento a través de una situación idealizada. Imaginemos un sistema inercial en el cual el centro de la tierra se encuentra aproximadamente en reposo durante el período de tiempo que toma en llegar una señal del satélite al suelo. Cada satélite emite periódicamente una señal de microondas codificada con el tiempo y la localización espacial del mismo en el sistema de coordenadas del referencial inercial. Un observador en la superficie de la tierra que recibe la señal un tiempo después puede calcular su distancia al satélite multiplicando el intervalo de tiempo transcurrido por c . Utilizando la señal de tres satélites el observador puede estimar su posición espacial como el punto de intersección de tres esferas. La señal de un cuarto satélite permite una localización espacio-temporal completa. Si se toman en cuenta las señales de más satélites se puede mejorar la resolución. Para que todo esto sea posible, el tiempo propio de cada satélite debe ser corregido a fin obtener el tiempo correcto en el referencial inercial por dos motivos: la dilatación temporal de la relatividad especial y los efectos del campo gravitacional antes discutidos. Si bien los parámetros del problema (velocidades de los satélites, distancia a la tierra, etc.) son tales que estos efectos son pequeños, para obtener una resolución espacial del orden de los metros es necesario tomar en cuenta estas correcciones. Mas aún, también es necesario tomar en cuenta la rotación de la tierra (sistema

5.4. TEORÍA GEOMÉTRICA DE LA GRAVEDAD

no inercial), errores en los relojes, efecto Doppler, efectos de refracción de la señal en la ionósfera terrestre, etc., etc..

Espacio-tiempo curvo

Como puede explicarse la diferencia entre las frecuencias de emisión y recepción a diferentes potenciales gravitatorios?

Una explicación posible es que la gravedad altera los relojes, de la siguiente manera. En ausencia de cualquier campo gravitacional, dos relojes en reposo en un referencial inercial están sincronizados (marcan exactamente el mismo tiempo). En presencia de un campo gravitacional el espacio-tiempo no resulta afectado (continúa siendo el espacio-tiempo plano de la relatividad especial) pero los relojes funcionan a un ritmo que difiere en un factor $(1 + \Phi/c^2)$ respecto del que tendrían en ausencia de gravedad, donde Φ es el potencial gravitatorio en la localización del reloj. Cuanto mayor Φ mas rápido anda el reloj. Así, los relojes a mayor potencial andan mas rápido que los que se encuentran a menor potencial y esto explica la diferencia entre las frecuencias de emisión y recepción de señales entre Andrea y Bernardo. Todos los relojes son afectados de la misma manera.

Este tipo de explicación es análoga a la siguiente. Supongamos una persona cree firmemente que en realidad la tierra es plana y que su curvatura es solo aparente. Esta persona dispone de un mapamundi en alguna de sus proyecciones (digamos la Mercator) y confía plenamente en ella. Para esta persona ese mapa representa fielmente la superficie de la tierra. Ese es su axioma. Sin embargo, se topa con el siguiente hecho empírico. Cuando un avión viaja a lo largo de un paralelo, las distancias son mas cortas de lo que marca el mapa cuanto mas lejos del ecuador viaja. Por ejemplo, de acuerdo con el mapa, la distancia a recorrer para atravesar Sudamerica en su parte mas ancha es aproximadamente la misma que para atravesar Groenlandia. Sin embargo, los instrumentos del avión marcan una distancia mucho menor! Como lo explica? Una explicación que mantiene el axioma del mapa correcto es que las reglas (instrumentos para medir longitudes) cambian su longitud a medida que nos movemos de sur a norte. Cuanto mas lejos del ecuador nos movemos, las reglas se hacen mas largas y por lo tanto las distancias que miden parecen mas cortas. Así, elabora una teoría acerca de un "campo" especial que altera la longitud las reglas de acuerdo con la latitud. Una teoría de este tipo para ser consistente tiene que asumir que dicho campo tiene que afectar *todas* las longitudes de la misma manera. Es decir, dicho campo tiene que afectar no solo las reglas propiamente dichas, sino tambien todos los objetos, los pasajeros, el avión (incluso la cantidad de combustible que consume), etc. De otra manera veríamos que los objetos se deforman!

La explicación mediante un espacio-tiempo plano de los relojes en un campo

gravitatorio y la explicación de las reglas que cambian en una tierra plana tienen en común lo siguiente: ambas asumen una geometría subyacente que no es posible medir directamente, debido a que todos los instrumentos son afectados de igual manera.

Es mucho más simple, económico en hipótesis y en última instancia con mayor poder predictivo desechar la hipótesis de una tierra plana, aceptar que las reglas miden correctamente y que vivimos arriba de una esfera. De la misma manera, es mucho más simple, económico en hipótesis y con mayor poder predictivo aceptar que los relojes miden correctamente el tiempo y que en presencia de gravedad la geometría del espacio-tiempo no es plana. Esta es la línea de pensamiento de la Relatividad General.

5.4.3 Gravedad Newtoniana en términos de espacio-tiempo curvo

A fin de tener una primera noción acerca de como sería una teoría geométrica de la gravedad, vamos a considerar primero un modelo geométrico simple que permite explicar la gravedad en el límite newtoniano. En este modelo la geometría plana del espacio-tiempo de la Relatividad Especial es modificada incorporando una pequeña curvatura (podemos pensarlo como una perturbación) que permite explicar el comportamiento de los relojes antes discutido.

La geometría espacio-temporal en este modelo se describe a través del elemento de línea

$$ds^2 = - \left(1 + \frac{2\Phi(\vec{x})}{c^2} \right) (cdt)^2 + \left(1 - \frac{2\Phi(\vec{x})}{c^2} \right) (dx^2 + dy^2 + dz^2) \quad (5.66)$$

donde el potencial $\Phi(\vec{x})$ es solución de la ecuación de Poisson (5.53) y se assume que se anula en infinito. Por ejemplo, alrededor de la tierra $\Phi(r) = -GM/r$, donde M es la masa terrestre. De hecho este elemento de línea es la predicción de la Relatividad General para pequeñas curvaturas producidas por fuentes gravitatorias estáticas débiles. Por ejemplo, es una buena aproximación para la curvatura del espacio-tiempo producida por el sol.

El intervalo de tiempo propio de un observador cualquiera es $d\tau^2 = -ds^2/c^2$, al igual que en relatividad especial. Así, de la Ec.(5.66) resulta inmediato que el tiempo propio de observadores estáticos en diferentes posiciones es en principio diferente, esto es $d\tau^2 = (1 + 2\Phi(\vec{x})/c^2)dt^2$. La explicación a los ritmos diferentes de los relojes es inmediata. Consideremos el diagrama de espacio-tiempo de la Fig.5.9. Supongamos que las señales se propagan en la dirección x . En la figura se muestran las líneas de mundo del emisor y receptor x_A y x_B respectivamente,

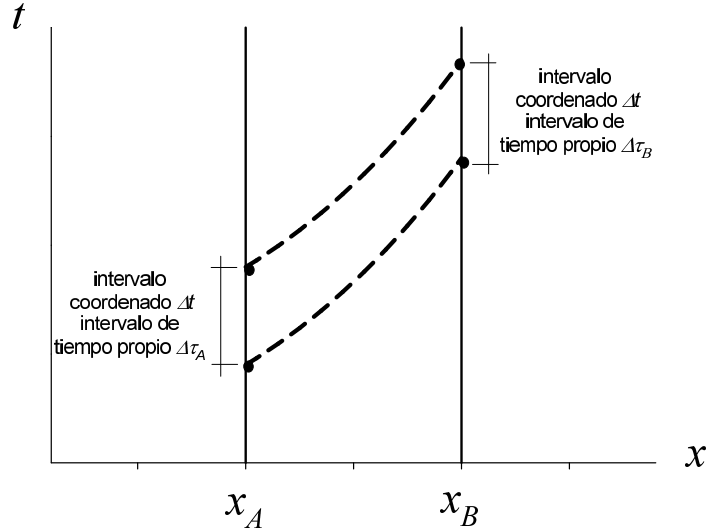


FIGURE 5.9: . Diagrama espacio-tiempo para la emisión y recepción de señales en el modelo de espacio-tiempo curvo (5.66).

así como las líneas de mundo de dos señales consecutivas. Las señales emitidas están separadas por un intervalo Δt en la coordenada t , que corresponde a un intervalo de tiempo propio del emisor $\Delta\tau_A$. Las líneas de universo de las señales luminosas no son rectas de pendiente c como en la geometría plana, ya que ahora el espacio-tiempo es curvo. Sin embargo, dado que la métrica no depende de la coordenada t , la forma de las trayectorias para ambas señales será la misma, pero estarán separadas por una distancia constante Δt . Así, de la Ec.(5.66) tenemos que

$$\Delta\tau_A = \sqrt{\left(1 + \frac{2\Phi_A}{c^2}\right)} \Delta t \approx \left(1 + \frac{\Phi_A}{c^2}\right) \Delta t \quad (5.67)$$

donde hemos asumido $\Phi_A/c^2 \ll 1$. De la misma manera

$$\Delta\tau_B = \left(1 + \frac{\Phi_B}{c^2}\right) \Delta t \quad (5.68)$$

Eliminando Δt de las dos ecuaciones anteriores obtenemos

$$\Delta\tau_B = \left(1 + \frac{\Phi_B - \Phi_A}{c^2}\right) \Delta\tau_A \quad (5.69)$$

que es el mismo resultado obtenido a partir del principio de equivalencia.

Movimiento newtoniano en términos geométricos

Hemos visto que en relatividad especial la trayectoria de una partícula libre en el espacio-tiempo plano es aquella que extremiza el tiempo propio. El mismo principio variacional nos da el movimiento de una partícula en un potencial gravitacional Φ si utilizamos el elemento de línea (5.66). El tiempo propio entre dos eventos A y B viene dado por

$$\begin{aligned} \tau_{AB} &= \int_A^B d\tau = \int_A^B \left(-\frac{ds^2}{c^2}\right)^{1/2} \\ &= \int_A^B \left[\left(1 + \frac{2\Phi}{c^2}\right) dt^2 - \frac{1}{c^2} \left(1 - \frac{2\Phi}{c^2}\right) (dx^2 + dy^2 + dz^2) \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (5.70)$$

donde la integral es a lo largo de la línea de mundo que une A con B. Usando la coordenada t para parametrizar la curva obtenemos

$$\tau_{AB} = \int_{t_A}^{t_B} dt \left\{ \left(1 + \frac{2\Phi}{c^2}\right) - \frac{1}{c^2} \left(1 - \frac{2\Phi}{c^2}\right) \left[\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dz}{dt}\right)^2 \right] \right\}^{1/2} \quad (5.71)$$

El término entre corchetes es el módulo de la velocidad de la partícula al cuadrado V^2 . Vamos a aproximar esta expresión a orden Φ/c^2 y V^2/c^2 (velocidades no relativistas). Obtenemos así

$$\tau_{AB} \approx \int_{t_A}^{t_B} dt \left[1 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{1}{2} V^2 - \Phi \right) \right] \quad (5.72)$$

Dado que el primer término en la integral es independiente de la trayectoria, la expresión a extremar es

$$\int_{t_A}^{t_B} dt \left(\frac{1}{2} V^2 - \Phi \right)$$

que resulta equivalente a una integral de acción para el Lagrangiano

$$L\left(\frac{d\vec{x}}{dt}, \vec{x}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{d\vec{x}}{dt}\right)^2 - \Phi(\vec{x}) \quad (5.73)$$

Si multiplicamos (5.73) por la masa m de la partícula obtenemos precisamente el Lagrangiano de una partícula no relativista en un potencial gravitacional $\Phi(\vec{x})$. Aplicando las ecuaciones de Euler-Lagrange se obtiene

$$\frac{d^2\vec{x}}{dt^2} = -\nabla\Phi(\vec{x}) \quad (5.74)$$

la cual multiplicada por m nos da la segunda ley de Newton.

Vemos así como la gravedad newtoniana puede ser enteramente expresada en términos geométricos en un espacio-tiempo descrito por el elemento de línea (5.66). En la descripción newtoniana cierta distribución de materia produce un campo gravitatorio asociado al potencial Φ , el cual determina el movimiento de otra partícula a través de $m\vec{a} = -m\nabla\Phi$; en la descripción geométrica cierta distribución de materia produce una curvatura en el espacio-tiempo (5.66) y las partículas se mueven en esta geometría a lo largo de geodésicas (camino de tiempo propio extremal). Los conceptos de fuerza y efectos sobre relojes son reemplazados por ideas geométricas. Mas aún, la igualdad entre masa inercial y gravitacional resulta automáticamente explicada, ya que la masa no entra para nada en la descripción del movimiento de las partículas. La ley de movimiento es la misma que para una partícula libre, pero en un espacio-tiempo curvo. El único rol de la masa en esta descripción es el de curvar el espacio-tiempo.

5.5 Relatividad General

Con los elementos que hemos visto hasta aquí estamos en condiciones de describir la estructura general de la teoría geométrica de la gravedad, esto es, la Relatividad General y discutir algunas de sus predicciones más importantes.

Como ya hemos discutido, la geometría del espacio-tiempo se describe en general mediante un elemento de línea ds^2 que nos da la distancia entre puntos cercanos. Para escribir el elemento de línea necesitamos disponer de un sistema de cuatro coordenadas x^α ($\alpha = 0, 1, 2, 3$) para describir los puntos y especificar la distancia entre puntos separados por intervalos de coordenadas dx^α . La elección del sistema de coordenadas es arbitrario, en tanto nos provea de una descripción única de los puntos en la región del espacio-tiempo a estudiar. Por lo demás, la elección de un sistema particular depende solo de conveniencias de cálculo, según las simetrías del problema a tratar. Un elemento de línea especifica una geometría, pero una misma geometría puede ser descrita por diferentes

elementos de línea, debido a los diferentes sistemas de coordenadas disponibles. Por ejemplo, el espacio-tiempo plano de la relatividad especial puede resumirse en coordenadas cartesianas por la expresión familiar

$$ds^2 = -(cdt)^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (5.75)$$

La parte espacial puede ser transformada a coordenadas polares mediante

$$x = r \sin \theta \cos \phi \quad y = r \sin \theta \sin \phi \quad z = r \cos \theta.$$

Reemplazando en la Ec.(5.75) obtenemos

$$ds^2 = -(cdt)^2 + dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2 \quad (5.76)$$

Esta expresión luce diferente de la Ec.(5.75), pero representa exactamente la misma geometría de espacio-tiempo plano.

En términos generales el elemento de línea viene dado por

$$ds^2 = g_{\alpha\beta}(x) dx^\alpha dx^\beta \quad (5.77)$$

donde $g_{\alpha\beta}(x)$ es un tensor simétrico de rango 2 (una matriz) dependiente de la posición denominado tensor métrico o simplemente *métrica*. Por ejemplo, para el elemento de línea (5.75) tenemos la métrica de Minkowski $g_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta}$, donde $\eta_{\alpha\beta}$ viene dada por la Ec.(5.36).

La teoría de la Relatividad General fue introducida por Albert Einstein en 1915. La variable central en esta teoría es la métrica, la cual se obtiene de las ecuaciones de campo de Einstein, o simplemente Ecuaciones de Einstein. Las mismas constituyen un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales (no lineales) para la métrica $g_{\alpha\beta}(x)$, dada una distribución de materia (materia o energía, ambas son equivalentes en la relatividad). Son análogas a las ecuaciones de Maxwell, las cuales determinan los potenciales electromagnéticos, para distribuciones dadas de carga y corrientes. Las ecuaciones de Einstein son altamente complejas y para los fines del presente curso nos basta con saber que permiten calcular la métrica para situaciones particulares y en lo que resta de este capítulo exploraremos algunas de las consecuencias de tener un espacio-tiempo curvo.

La discusión precedente acerca del principio de equivalencia nos sugiere que las propiedades locales de un espacio tiempo curvo deben ser indistinguibles de aquellas del espacio-tiempo plano de la relatividad especial (recordemos que es posible eliminar localmente los efectos de la gravedad en un referencial acelerado apropiado). Una expresión concreta de esta idea física es el requerimiento de

5.5. RELATIVIDAD GENERAL

que, dada una métrica $g_{\alpha\beta}(x)$ en un sistema de coordenadas, en cada punto del espacio-tiempo es posible introducir nuevas coordenadas x'^{α} tales que

$$g'_{\alpha\beta}(x'_P) = \eta_{\alpha\beta} \quad (5.78)$$

donde $\eta_{\alpha\beta}$ es la métrica de Minkowski (5.36) y $x'_P{}^{\alpha}$ son las coordenadas de un punto particular P . Es fácil ver que, dada una métrica, siempre es posible encontrar un sistema de coordenadas tales que $g'_{\alpha\beta}(x'_P)$ es diagonal, ya que la métrica es una matriz simétrica 4x4; una vez diagonalizada es posible reescalar las coordenadas una a una, de manera que los elementos diagonales tomen todos valores de la métrica de Minkowski. Lo que no es siempre posible es encontrar una transformación de coordenadas que cambie el número de autovalores positivos y negativos. Es una **suposición** de la teoría que en cada punto existen tres autovalores positivos y uno negativo. Físicamente esto significa que hay tres dimensiones espaciales y una temporal.

Hasta donde es posible hacer coincidir la métrica con la del espacio-tiempo plano mediante transformaciones de coordenadas? Evidentemente no es posible encontrar coordenadas en las cuales $g_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta}$ en todo punto del espacio-tiempo: esto significaría que el espacio-tiempo es de hecho plano. Sin embargo puede demostrarse que (dentro de la estructura matemática supuesta de la teoría) siempre es posible encontrar coordenadas x'^{α} tales que, además de la condición (5.78), las derivadas primeras de la métrica se anulan en el punto P :

$$g'_{\alpha\beta}(x'_P) = \eta_{\alpha\beta} \quad \left. \frac{\partial g'_{\alpha\beta}}{\partial x'^{\gamma}} \right|_{x'=x'_P} = 0. \quad (5.79)$$

Un sistema de coordenadas que satisface estas condiciones se denomina un *referencial inercial local* en el punto P . Las propiedades en un entorno pequeño de P en estas coordenadas son las mismas que las del espacio-tiempo plano. Las ecuaciones (5.79) pueden ser satisfechas en cualquier otro punto, pero en un sistema de coordenadas diferentes. La distancia espacio-temporal entre el punto P y sus vecinos puede ser calculada tanto en las coordenadas de (5.77) como en aquellas correspondientes al referencial inercial local. Esto significa que la relatividad general hereda la estructura local de conos de luz de la relatividad especial. Puntos separados de P por intervalos de coordenadas infinitesimales dx^{α} podrán tener separaciones tipo temporal ($ds^2 < 0$), tipo espacial ($ds^2 > 0$) o nula ($ds^2 = 0$). Los rayos de luz se mueven por curvas nulas, a lo largo de las cuales $ds^2 = 0$. La familia de direcciones nulas que emergen de o convergen al punto P expanden los conos de luz locales de pasado y futuro en P . Así, los conos de luz locales son tangentes a las líneas de mundo nulas.

Las partículas materiales (masa en reposo no nula) se mueven a lo largo de líneas de mundo tipo temporal, las cuales pueden ser descritas paramétricamente por cuatro funciones $x^\alpha(\tau)$ de la distancia τ a lo largo de la misma. La distancia entre dos eventos A y B a lo largo de una línea de mundo tipo temporal está dada por el tiempo propio

$$\tau_{AB} = \frac{1}{c} \int_A^B [-g_{\alpha\beta}(x) dx^\alpha dx^\beta]^{1/2} \quad (5.80)$$

donde la integral es a lo largo de la línea de mundo. Un reloj que se mueve con la partícula a lo largo de esta curva mide la distancia espacio-temporal τ , el cual es por lo tanto el tiempo propio en ese referencial. Una línea de mundo tipo temporal con $ds^2 < 0$ ó $d\tau^2 = -ds^2/c^2 > 0$ se encuentra dentro del cono de luz local en cada punto de la trayectoria. Esto implica que las partículas se mueven siempre a velocidades inferiores a la de la luz.

Ahora bien, dada la métrica, cual es la ecuación de movimiento para las partículas (el equivalente de la segunda ley de Newton)? Vamos a considerar por simplicidad partículas solo bajo la acción de la gravedad (es decir, libres de cualquier otra influencia, tal como fuerzas electromagnéticas), a las cuales llamaremos "partículas libres". Mas aún, vamos a considerar partículas de prueba, esto es, partículas de masa suficientemente pequeña tal que la curvatura que producen es despreciable. El principio general que rige el movimiento de partículas libres de prueba en un espacio-tiempo curvo es entonces el mismo principio variacional que en Relatividad Especial: *la línea de mundo de una partícula de prueba libre entre dos puntos separados por un intervalo tipo temporal ($ds^2 < 0$) es el que extrema el tiempo propio entre ellos*. Una línea de mundo que corresponde a un tiempo propio extremal se denomina *geodésica* y la ecuación de movimiento que la determina *ecuación de la geodésica*. Notemos que hablamos de tiempo propio extremo y no máximo, como en Relatividad Especial (espacio-tiempo plano). En un espacio-tiempo curvo una curva de tiempo propio extremal corresponde también a un máximo solo si existe una única curva extremal conectando un par de puntos. No obstante, esto no es necesariamente cierto para un camino extremal entre dos puntos en un espacio-tiempo curvo. Por ejemplo, en una esfera existen dos caminos de distancia extremal entre dos puntos cualesquiera.

El procedimiento para encontrar la ecuación de la geodésica es directo. Dados dos puntos A y B una línea de mundo entre ellos puede ser descrito paramétricamente dando las cuatro coordenadas x^α en función de algún parámetro genérico σ que varía entre $\sigma = 0$ en A y $\sigma = 1$ en B . El tiempo propio (5.80) puede escribirse entonces como:

$$\tau_{AB} = \frac{1}{c} \int_0^1 d\sigma \sqrt{-g_{\alpha\beta}(x) \frac{dx^\alpha}{d\sigma} \frac{dx^\beta}{d\sigma}} \quad (5.81)$$

Esta expresión cumple un rol análogo al de una integral de acción en la formulación Lagrangiana de la mecánica, correspondiente al Lagrangiano

$$L \left(\frac{dx^\alpha}{d\sigma}, x^\alpha \right) = \sqrt{-g_{\alpha\beta}(x) \frac{dx^\alpha}{d\sigma} \frac{dx^\beta}{d\sigma}} \quad (5.82)$$

Las ecuaciones de movimiento son entonces aquellas que satisfacen las ecuaciones de Euler-Lagrange

$$-\frac{d}{d\sigma} \left(\frac{\partial L}{\partial(dx^\alpha/d\sigma)} \right) + \frac{\partial L}{\partial x^\alpha} = 0 \quad (5.83)$$

Resulta conveniente expresar las ecuaciones de movimiento en términos del tiempo propio τ a lo largo de la trayectoria. Usando que

$$L = \frac{d\tau}{d\sigma} \Rightarrow \frac{dx^\alpha}{d\sigma} = L \frac{dx^\alpha}{d\tau}$$

puede verse que la ecuación de la geodésica resulta

$$\frac{d^2 x^\alpha}{d\tau^2} = -\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha \frac{dx^\beta}{d\tau} \frac{dx^\gamma}{d\tau} \quad (5.84)$$

donde los coeficientes $\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha$ se denominan *símbolos de Christoffel* y se calculan de las ecuaciones

$$g_{\alpha\delta} \Gamma_{\beta\gamma}^\delta = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial g_{\alpha\beta}}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial g_{\alpha\gamma}}{\partial x^\beta} - \frac{\partial g_{\beta\gamma}}{\partial x^\alpha} \right) \quad (5.85)$$

En términos de la cuadrivelocidad u la ecuación de la geodésica resulta

$$\frac{du^\alpha}{d\tau} = -\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha u^\beta u^\gamma \quad (5.86)$$

En el caso de la métrica de Minkowski $g_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta}$ tenemos que $\Gamma_{\beta\gamma}^\delta = 0$, de donde recuperamos la ecuación de movimiento para una partícula libre de la Relatividad especial:

$$\frac{du^\alpha}{d\tau} = 0$$

Las cuatro ecuaciones diferenciales (5.84) no son independientes, ya que

$$c^2 d\tau^2 = -g_{\alpha\beta}(x) dx^\alpha dx^\beta$$

y por lo tanto

$$g_{\alpha\beta}(x) u^\alpha u^\beta = -c^2 \quad (5.87)$$

5.5.1 Geometría en el entorno de una estrella esférica

Una de las soluciones mas simples de las ecuaciones de Einstein y una de las mas útiles es la que se obtiene en el espacio vacío en los alrededores de una fuente de curvatura esféricamente simétrica, tal como una estrella esférica. Esta fue obtenida en 1916 por Karl Schwarzschild y por ello se la denomina geometría de Schwarzschild. En un sistema particular de coordenadas, la misma se resume en el elemento de línea

$$ds^2 = - \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right) (cdt)^2 + \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right)^{-1} dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2) \quad (5.88)$$

Las coordenadas se denominan coordenadas de Schwarzschild. La métrica asociada (llamada por supuesto de Schwarzschild) en el sistema de coordenadas (t, r, θ, ϕ) es

$$g_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} -c^2 \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right)^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix} \quad (5.89)$$

A t y r constantes, el elemento de línea (5.88) describe la geometría de una superficie esférica bidimensional de radio r en el espacio euclideo tridimensional. La geometría de Schwarzschild tiene por lo tanto simetría esférica, en lo que respecta a cambios en los ángulos θ y ϕ . La coordenada r no debe interpretarse estrictamente como la distancia a un "centro" (ya que el espacio es curvo). Una interpretación mas clara resulta de calcular el área de una de dichas esferas bidimensionales de radio r , la cual puede verse viene dada por la fórmula standard $A = 4\pi r^2$.

Si $GM/c^2 r \ll 1$, el coeficiente de dr^2 en (5.88) puede ser desarrollado como

$$ds^2 \approx - \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right) (cdt)^2 + \left(1 + \frac{2GM}{c^2 r}\right) dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2), \quad (5.90)$$

que resulta equivalente a la métrica del modelo geométrico de gravedad newtoniana (5.66) con un potencial $\Phi = -GM/r$. Esto lleva a la identificación de la constante M con la masa total de la fuente de curvatura (M puede pensarse como una constante de integración en la solución de las ecuaciones de Einstein).

Evidentemente algo interesante pasa con la métrica para $r = 0$ y $r = 2GM/c^2$. Este último se denomina *radio de Schwarzschild* y constituye una longitud característica para la curvatura en la geometría de Schwarzschild. Sin embargo, la superficie de estrellas estáticas ocurre siempre a radios mayores que el de Schwarzschild⁷. En el interior de una estrella la solución es diferente de la de Schwarzschild y ambas deben ser empalmadas. Así, en tanto analicemos el comportamiento fuera de una estrella estas singularidades no resultan relevantes.

Órbitas: precesión del perihelio

Analicemos las ecuaciones de movimiento de una partícula en la geometría de Schwarzschild (por ejemplo, un planeta en órbita alrededor de una estrella), esto es, la ecuación de la geodésica. La métrica (5.89) no depende de t ni de ϕ , lo cual implica que existen constantes de movimiento asociadas. Así, por ejemplo la ecuación de Euler-Lagrange para t nos dá

$$\frac{\partial L}{\partial(dt/d\sigma)} = \frac{-g_{tt}}{L} \frac{dt}{d\sigma} = -g_{tt} \frac{dt}{d\tau} = cte$$

de donde

$$c^2 \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right) \frac{dt}{d\tau} = c^2 \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right) u^t = e \quad (5.91)$$

y en forma semejante

$$r^2 \sin^2 \theta u^\phi = l \quad (5.92)$$

Para r grande, e resulta la energía por unidad de masa (en reposo) en el espacio-tiempo plano, $E = mc^2 u^t$. Dado que e es una cantidad conservada que resulta de una simetría temporal, asumimos que e es la energía por unidad de masa en cualquier parte. De la misma manera, l resulta el momento angular por unidad de masa en reposo. La conservación del momento angular implica que las órbitas yacen en un "plano", al igual que en la mecánica newtoniana. Para ver esto tomemos un instante particular y sea \vec{u} la componente espacial de la

⁷Por ejemplo, el radio de Schwarzschild para el sol es $\sim 3 \text{ Km}$, mientras que el radio de la superficie solar es $\sim 7 \times 10^5 \text{ Km}$

cuadrivelocidad. Siempre podemos rotar el sistema de coordenadas para que $u^\phi = 0$ para algún ángulo particular $\phi = \phi^*$ (podemos tomar $\phi^* = 0$ sin pérdida de generalidad). Por la Ec.(5.92) tenemos que u^ϕ será cero en toda la geodésica y por lo tanto la partícula permanecerá en el "plano" meridional $\phi = 0$. Una vez establecido esto, es simple reorientar las coordenadas de manera que la órbita esté en el "plano" ecuatorial $\theta = \pi/2$ y por lo tanto $u^\theta = 0$.

El resto del análisis es muy semejante al de la mecánica newtoniana. Tenemos ya dos integrales de movimiento. La normalización (5.87) nos provee una tercera. Así, de las Ecs.(5.87) y (5.89) tenemos

$$-c^2 \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right) (u^t)^2 + \left(1 - \frac{2GM}{c^2 r}\right)^{-1} (u^r)^2 + r^2 (u^\phi)^2 = -c^2.$$

Eliminando u^t y u^ϕ de las Ecs.(5.91) y (5.92), reemplazando en la expresión anterior y con un poco de álgebra (queda como ejercicio para el lector) llegamos a la siguiente ecuación para la componente radial de la cuadrivelocidad $u^r = dr/d\tau$:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2c^2} \left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 + V_{ef}(r) \quad (5.93)$$

donde

$$V_{ef}(r) = \frac{1}{c^2} \left[-\frac{GM}{r} + \frac{l^2}{2r^2} - \frac{GMl^2}{c^2 r^3} \right] \quad (5.94)$$

$$\mathcal{E} = \frac{e^2 - c^4}{2c^4} \quad (5.95)$$

La ecuación (5.93) tiene la misma estructura que la ecuación para la velocidad radial en el problema de potencial central en mecánica newtoniana. Mas aún, definiendo $E_{newt} = mc^2 \mathcal{E}$ obtenemos

$$E_{newt} = \frac{m}{2} \left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 + \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{GMm}{r} - \frac{GMl^2}{c^2 mr^3} \quad (5.96)$$

donde $L = ml$. Esta ecuación tiene exactamente la misma forma que la integral de energía en mecánica newtoniana, con la corrección relativista proporcional a $1/r^3$. El límite de la gravedad newtoniana se obtiene para distancias suficientemente grandes (de manera que el término proporcional a $1/r^3$ pueda ser despreciado) y velocidades suficientemente bajas, de manera que la derivada respecto de τ pueda ser reemplazada por una derivada respecto de t .

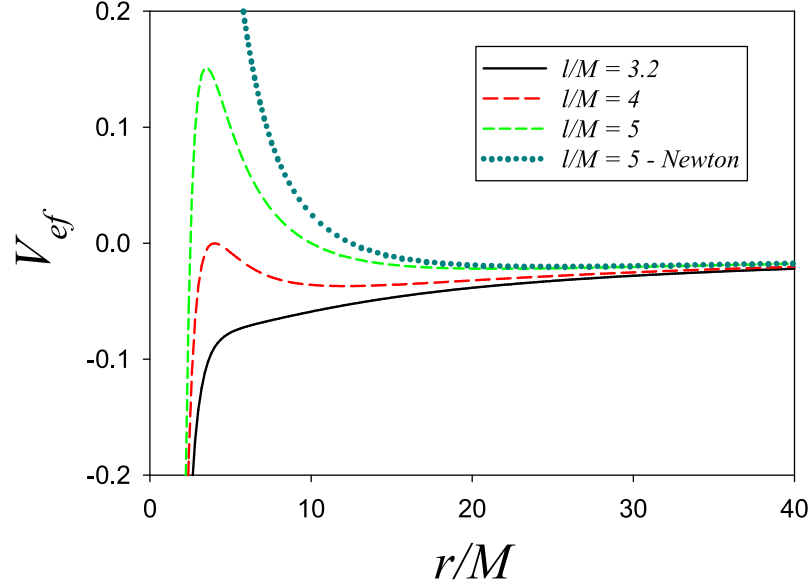


FIGURE 5.10: . Potencial efectivo ($G = c = 1$) para diferentes valores del momento angular l . La línea punteada corresponde al potencial efectivo Newtoniano para $l/M = 5$.

El potencial efectivo se muestra en la Fig.5.10, donde se compara con el correspondiente caso newtoniano. La diferencia más notable con el caso newtoniano es la ausencia de una barrera centrífuga infinita para valores pequeños de r y $l \neq 0$. Para valores grandes de r el potencial aproxima rápidamente el comportamiento newtoniano, especialmente para valores grandes de l/M . A título ilustrativo, para la órbita terrestre alrededor del sol tenemos $l/M \sim 10^9$.

El resto del análisis es el mismo que en la mecánica newtoniana. Si la Ec.(5.93) tiene un solo punto de retorno, esto es, un único valor de r para el cual $\mathcal{E} = V_{ef}(r)$, la trayectoria, o bien comienza y termina en infinito, o bien converge al origen. Si tenemos 2 puntos de retorno r_{min} y r_{max} , la trayectoria será oscilatoria en r . La ecuación de la trayectoria, esto es, ϕ en función de r se obtiene combinando la Ec.(5.93) con la ecuación para el momento angular $l = r^2 d\phi/d\tau$, de donde

$$\frac{d\phi}{dr} = \pm \frac{l}{c^2 r^2} \frac{1}{\sqrt{2(\mathcal{E} - V_{ef}(r))}}$$

Integrando esta ecuación para r variando de r_{min} a r_{max} y nuevamente hasta r_{min} podemos calcular la variación del ángulo $\Delta\phi$ en ese período. Si $\Delta\phi = 2\pi q/n$, con q y n enteros, entonces la trayectoria es cerrada: luego de n períodos la partícula dió q vueltas y regresó a su posición inicial. La corrección relativista del potencial central tiene varios efectos, siendo tal vez el mas importante el siguiente. Es sabido de la mecánica newtoniana⁸ que hay solamente dos tipos de potencial central para los cuales las trayectorias son cerradas: aquellos en que el potencial varía como $1/r$ y aquellos para los cuales varía como r^2 . La presencia de la corrección $\propto 1/r^3$ implica por lo tanto que las órbitas son abiertas, barriendo indefinidamente la corona comprendida entre r_{min} y r_{max} , tal como si fuera una elipse cuyo eje mayor rota alrededor del foco. Este fenómeno se conoce como *precesión del perihelio* y ya había sido observada en la órbita del Mercurio durante el siglo XIX, sin poder ser explicada desde la mecánica Newtoniana. La predicción precisa del ángulo de precesión de Mercurio fué uno de los primeras corroboraciones experimentales de la Relatividad General.

5.5.2 Agujeros negros y el colapso gravitacional

La vida de una estrella

La historia de vida de una estrella es una historia de competencia entre la atracción gravitatoria, que tiende a contraerla, y una presión expansiva de origen no gravitatorio que la contiene. La historia comienza con el colapso gravitatorio de una nube de gas interestelar, compuesta mayormente por hidrógeno y helio, la cual se encuentra circunstancialmente mas fría (con menor energía cinética) y mas densa que su entorno. A medida que este gas se condensa, su temperatura aumenta por compresión hasta que alcanza un valor suficientemente alto como para iniciar la fusión del hidrógeno, el cual se transforma en helio y libera energía. La estrella alcanza entonces un estado estacionario, en el cual la pérdida de energía por radiación se encuentra balanceada por la energía producida en la fusión del hidrógeno. La materia se encuentra confinada a una región del espacio, de tal manera que la atracción gravitatoria se encuentra balanceada por la expansión térmica del gas. Este es el estado presente de nuestro sol.

Eventualmente una fracción significativa del hidrógeno presente se consume y el combustible nuclear resulta insuficiente para compensar las perdidas por radiación. La contracción gravitatoria recomienza, aumentando nuevamente la temperatura por compresión hasta que esta alcanza un valor suficientemente alto para disparar la fusión del helio, el cual se transforma en otros elementos mas pesados. La temperatura en la superficie de la estrella aumenta y se vuelve mas

⁸L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Mecánica*, Ed. Reverté, 1978, Cap. 3, versículo 14.

brillante. Eventualmente la cantidad de helio también se vuelve insuficiente, el núcleo de la estrella se contrae nuevamente y se inician nuevas reacciones nucleares. Cuando termina este proceso? Evidentemente no puede continuar más allá de la formación de núcleos de ${}^{56}\text{Fe}$, ya que estos tienen la mayor energía de ligadura por nucleón. De esta manera, cuando la fracción de núcleos pesados (Fe u otros elementos cercanos en la tabla periódica) supera cierto umbral, las reacciones nucleares no proveen suficiente energía para contrarrestar la contracción gravitatoria. Que ocurre entonces cuando se agota el combustible termonuclear? Hay dos posibilidades. O bien la estrella alcanza un nuevo estado de equilibrio, en el cual la atracción gravitacional resulta contrarrestada por una fuente de presión no térmica, o bien la estrella no alcanza más un estado de equilibrio y su estado final es un *colapso gravitacional*.

Una fuente importante de presión no térmica la provee el principio de exclusión de Pauli, en cuyo caso se denomina *presión de Fermi*. Otra fuente de presión no térmica son las fuerzas de repulsión nucleares.

Las estrellas en las cuales el colapso gravitacional es soportado por la presión de Fermi debida a los electrones se denominan *enanas blancas*. Las enanas blancas son estrellas con masas del orden de la masa solar, pero con un radio de solo unos pocos miles de kilómetros. La temperatura en estas estrellas es del orden $\sim 10^7 \text{ K}$. A esta temperatura los átomos se encuentran completamente ionizados y el gas puede pensarse como un plasma compuesto por núcleos de carga positiva y electrones. Un modelo simple consiste en considerar el gas de electrones como un gas ideal de Fermi. La densidad de estas estrellas corresponde a una densidad de electrones $\rho_e \sim 10^{30} \text{ electrones/cm}^3$. La temperatura de Fermi resulta así

$$T_F = \epsilon_F/k_B = \frac{\hbar^2}{2mk_B} (3\pi^2\rho_e)^{2/3} \sim 10^{11} \text{ K}$$

Dado que la temperatura de Fermi es mucho mayor que la de la estrella, el gas de electrones se encuentra fuertemente degenerado (en su estado fundamental). La presión de punto cero del gas de Fermi es la que contrarresta la atracción gravitacional debida a la mayor masa de los núcleos. No obstante, si la masa de la estrella es muy grande, aún la presión de Fermi electrónica resulta insuficiente para contener el colapso gravitacional. Podemos hacer una estimación gruesa del valor de la masa crítica mediante el siguiente argumento. Supongamos que tenemos A electrones en un volumen esférico de radio R , de manera que $\rho_e \propto A/R^3$. El momento de Fermi es $p_F \propto \hbar\rho_e^{1/3}$. La mayor contribución a la energía total del gas de electrones está dada por aquellos niveles cercanos al de Fermi; para la alta densidad electrónica del problema, dichas energías serán elevadas, de manera que vamos a asumir que son relativistas. Así, en una

primera aproximación tenemos

$$E_e \approx A((m_e c^2)^2 + (p_{Fc})^2)^{1/2} \approx A p_{Fc} \approx A^{4/3} \hbar c / R$$

La energía gravitacional es proporcionada fundamentalmente por los protones, de manera que

$$E_G \approx -G(m_p A)^2 / R$$

Ambas energías varían como $1/R$. Si A es suficientemente grande, la energía total será negativa y favorable a que el sistema colapse disminuyendo R . El valor crítico de A por encima del cual esto ocurre resulta entonces $A_{crit} \approx (\hbar c / G m_p^2)^{3/2} \sim 10^{57}$ que corresponde a una masa crítica $M_{crit} \approx m_p A_{crit} \sim M_\odot$ (el símbolo \odot representa el sol). Un cálculo mas refinado muestra que $M_{crit} = 1.4 M_\odot$, el cual se conoce como *masa de Chandrasekhar*.

Para masas entre el límite de Chandrasekhar y 3 masas solares el objeto que se genera se conoce como *estrella de neutrones*. En el interior de las mismas las energías son tan elevadas (la temperatura es del orden de 10^9 K) que ocurre una recombinación de protones y electrones de manera que la mayor parte de la materia esta compuesta por neutrones (la corteza esta compuesta mayoritariamente por nucleos de Fe). La contracción gravitacional en estas estrellas esta soportada por la presión de Fermi debida a los neutrones y a las fuerzas de repulsión nucleares. El radio de una estrella de neutrones es de unas pocas decenas de kilometros! Para masas superiores a un límite entre dos y tres masas solares el colapso gravitacional es inevitable y lo que se genera se conoce como agujero negro.

El agujero negro de Schwarzschild

A fin de entender los aspectos esenciales de la física del colapso gravitacional consideremos el caso idealizado en que tanto el objeto que colapsa como el espacio circundante son esféricamente simétricos. En la discusión restante vamos a adoptar el sistema de unidades en el cual $G = c = 1$. El elemento de línea de Schwarzschild resulta entonces

$$ds^2 = - \left(1 - \frac{2M}{r}\right) dt^2 + \left(1 - \frac{2M}{r}\right)^{-1} dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2) \quad (5.97)$$

En la teoría de la gravitación newtoniana, el teorema de Newton (el equivalente al teorema de Gauss en la electrostática) nos dice que el potencial afuera de un cuerpo esféricamente simétrico es $-GM/r$, aún cuando el cuerpo

esta cambiando en el tiempo (ya que el potencial depende solo de la masa total, la cual se conserva). Un teorema semejante de la Relatividad General demuestra que, aún cuando la distribución de masa es dependiente del tiempo, la geometría fuera del colapso gravitacional esféricament simétrico es la de Schwarzschild Ec.(5.97). Así, a medida que el colapso evoluciona, la geometría de Schwarzschild se extiende a regiones cada vez mayores. En particular, las singularidades en la métrica para $r = 0$ y $r = 2M$ se vuelven relevantes.

La singularidad en $r = 2M$ en realidad no es una singularidad física, sino una singularidad coordenada. Para mostrar esto basta con encontrar un sistema de coordenadas en el cual la métrica no es singular. Existen muchos sistemas que muestran esto, pero uno particularmente util son las coordenadas de *Eddington-Finkelstein* (EF), en las cuales la coordenada t es reemplazada por una nueva coordenada v , a través de

$$t = v - r - 2M \log \left| \frac{r}{2M} - 1 \right| \quad (5.98)$$

Reemplazando en la Ec.(5.97), tanto para $r > 2M$ como para $r < 2M$ se obtiene

$$ds^2 = - \left(1 - \frac{2M}{r} \right) dv^2 + 2dvdr + r^2(d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2) \quad (5.99)$$

Vemos que la singularidad en $r = 2M$ fué removida por el cambio de coordenadas. Sin embargo, la singularidad en $r = 0$ persiste. De hecho puede demostrarse que $r = 0$ es un punto de curvatura infinita, es decir, con una densidad infinita de energía. Eso significa que la singularidad no puede ser eliminada con ningún cambio de coordenadas. Esta es una auténtica singularidad física. En general, una singularidad en una teoría física representa un límite de validez de la misma.

Para entender el significado del agujero negro de Schwarzschild resulta util analizar el comportamiento de los rayos de luz radiales en las coordenadas de EF, esto es, de las líneas de mundo nulas $ds^2 = 0$ para las cuales $d\theta = d\phi = 0$:

$$- \left(1 - \frac{2M}{r} \right) dv^2 + 2dvdr = 0$$

Tenemos dos posibles soluciones. En una de ellas $v = cte$. De la Ec.(5.98) vemos que esta solución corresponde a rayos que convergen a la singularidad $r = 0$, ya que para mantener $v = cte$, r debe disminuir cuando t aumenta. La otra solución corresponde a

$$- \left(1 - \frac{2M}{r} \right) dv + 2dr = 0.$$

Integrando esta ecuación se obtiene

$$v - 2 \left(r + 2M \log \left| \frac{r}{2M} - 1 \right| \right) = cte \quad (5.100)$$

Utilizando la Ec.(5.98) es fácil ver que las soluciones de (5.100) para $r > 2M$ corresponden a trayectorias que se alejan del origen (r creciente con t), mientras que las soluciones para $r < 2M$ corresponden a trayectorias que convergen al origen (r decreciente con t). En la figura 5.11 se muestran las soluciones anteriores en términos de las variables $t^* = v - r$ vs. r . Las soluciones con $v = cte$ en este gráfico resultan rectas a -45° del eje vertical. Las soluciones (5.100) para $r > 2M$ se alejan de $r = 0$, convergiendo a rectas a 45° para $r \gg 2M$ (en este límite $t^* \sim t$ y la líneas de mundo son las del espacio-tiempo plano; recordemos que $c = 1$). En las intersecciones entre líneas de mundo nulas se representan esquemáticamente algunos conos de luz futuros.

Vemos que la línea vertical correspondiente a $r = 2M$ separa dos regiones de comportamiento diferente. Para $r > 2M$ un rayo de luz puede alejarse de la singularidad (por la solución (5.100)) o converger a la misma (por la solución $v = cte$). Para $r < 2M$ ambas soluciones partiendo de un mismo punto convergen a la singularidad. Dado que las líneas de mundo tipo temporales se encuentran siempre dentro de los conos de luz, ninguna trayectoria que comienza con $r < 2M$ puede atravesar la frontera $r = 2M$, ya que para hacerlo debería salir a través de un cono de luz (y por lo tanto viajar a velocidad mayor que la luz)⁹. Para $r > 2M$ la luz (o una partícula material) puede escapar al infinito, mientras que para $r < 2M$ la gravedad es tan intensa que ni siquiera la luz puede escapar. Esto es lo que define la geometría de un agujero negro. La superficie $r = 2M$ (una esfera de área $A = 4\pi(2M)^2$) se conoce como *horizonte de eventos* del agujero negro. Un agujero negro se describe entonces desde la teoría como una singularidad cubierta por un horizonte de eventos. Físicamente resulta imposible obtener información de lo que ocurre dentro del horizonte.

Si bien la caracterización anterior fué obtenida para un agujero negro esféricamente simétrico, la fenomenología general (en particular la existencia de un horizonte) se mantiene en el caso de agujeros no simétricos.

5.6 Bibliografía recomendada

- J. B. Hartle, Gravity: An introduction to Einstein's General Relativity, Addison Wesley (2003).

⁹Si bien esto fué derivado para rayos radiales, se puede ver que las geodésicas nulas no radiales se encuentran comprendidas dentro de los anteriores

5.6. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

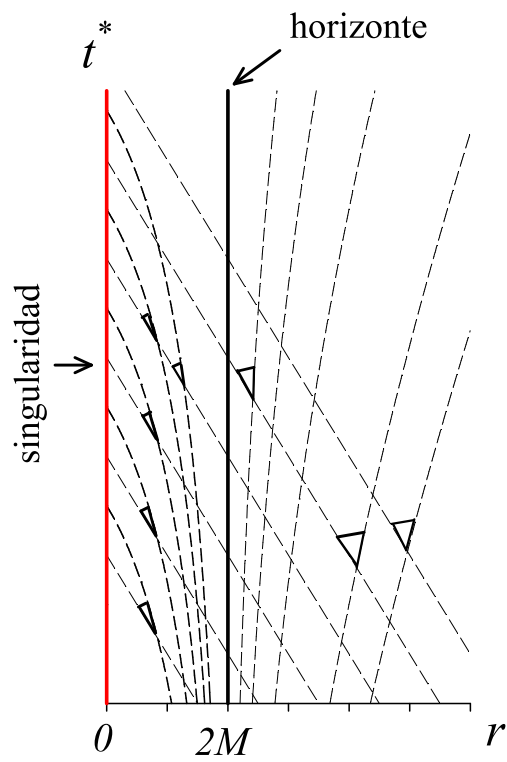


FIGURE 5.11: . Geodésicas nulas radiales en la geometría de Schwarzschild.

CAPÍTULO 6

NOCIONES DE COSMOLOGÍA

6.0.1 Modelos cosmológicos

La cosmología es la parte de la ciencia que estudia la estructura y evolución del universo a las mayores escalas espaciales y temporales. A estas escalas el comportamiento del universo está dominado por la gravedad, debido al carácter de largo alcance de las interacciones gravitatorias, a diferencia de las interacciones nucleares fuerte y débil. La interacción electromagnética también es de largo alcance y de intensidad mucho mayor que la gravitatoria. Sin embargo, el universo es eléctricamente neutro, de manera que a grandes escalas espaciales esta interacción resulta apantallada y la interacción que domina es la gravitatoria. La Relatividad General por lo tanto es de importancia central para la cosmología, la cual constituye una de las aplicaciones más importantes de esta teoría.

El universo visible en dos palabras

En los últimos años el conocimiento del universo, tanto a nivel observacional como teórico se ha incrementado dramáticamente, de manera que una descripción razonablemente completa del mismo está a años luz del presente curso. Nos vamos a limitar a resumir solo unos pocos aspectos fundamentales en los cuales se fundamentan los modelos cosmológicos más relevantes y su predicción más importante: el llamado *big bang*.

La materia visible en el universo está contenida mayormente en galaxias, esto es, colecciones de estrellas, gases (mayoritariamente H y He) y polvo (partículas pequeñas) aglomeradas por interacción gravitatoria. Una galaxia típica contiene

del orden de 10^{11} estrellas y una masa total del orden de $10^{12} M_{\odot}$. Hay del orden de 10^{11} galaxias en la parte del universo accesible a nuestras observaciones al día de hoy. Si la materia visible se distribuyera uniformemente sobre la mayor escala espacial detectable, correspondería al presente a una densidad del orden de $\rho_m \sim 10^{-31} \text{ g/cm}^3$, que corresponde aproximadamente a un protón por cm^3 .

Además de galaxias, el universo contiene radiación, compuesta partículas de masa en reposo nula, tales como fotones, ondas gravitacionales y tal vez cierto tipo de partículas llamadas neutrinos. La radiación con mayor densidad de energía es la *radiación cósmica de fondo*, que es la radiación electromagnética remanente del big bang. El espectro medido de esta radiación resulta con enorme precisión el de un cuerpo negro con una temperatura de 2.725 K . Este ajuste tan preciso al espectro de cuerpo negro es una de las evidencias experimentales más fuertes que soportan el big bang. La densidad de energía de un cuerpo negro a esta temperatura es aproximadamente de $\rho_r \sim 10^{-34} \text{ g/cm}^3$. Vemos que esta densidad es hoy mucho menor que la densidad promedio de materia. No obstante, la situación era la inversa en las etapas tempranas posteriores al big bang.

Existe una evidencia considerable de que la mayor parte de la masa en el universo no procede ni de la materia visible en las galaxias, ni de la radiación detectada hasta ahora¹. Esta masa faltante para explicar los fenómenos observados se conoce como *materia oscura*. Se estima que la materia oscura es del orden de 10 veces más que la materia visible. La naturaleza de esta materia oscura es un problema central de la cosmología aún abierto.

Existe otro tipo de energía presente en el universo que se conoce como *energía del vacío o energía oscura*. La misma es de origen cuántico y corresponde a la energía de punto cero (estado fundamental) del sistema de partículas. Esta es detectable a través de la formación espontánea de pares partícula-antipartícula predicha por la teoría cuántica de campos, la cual ha sido medida experimentalmente. Si bien no existe al presente una teoría fundamental que permita estimar la densidad de energía del vacío ρ_v , la misma puede ser detectada a través de sus efectos gravitacionales, ya que en relatividad toda forma de energía curva el espacio. Diversas observaciones astrofísicas indican que dicha densidad es constante en el espacio y el tiempo.

Otra observación importante es que, promediado sobre grandes escalas, el universo es *isotrópico* -las propiedades son las mismas en cualquier dirección- y *homogéneo* - las propiedades en un punto del espacio son las mismas que en

¹Por ejemplo, a partir del análisis de la distribución de velocidades de galaxias espirales; la distribución medida no concuerda con la distribución de masa observada bajo ningún modelo físico razonable.

cualquier otro punto. Las densidades de materia y energía son en promedio uniformes en el espacio.

Finalmente se observa que el universo se expande. El análisis espectral de galaxias fuera de nuestro grupo local muestra que todas presentan un corrimiento al rojo. Interpretado como efecto Doppler en un espacio-tiempo plano, este fenómeno implica que todas las galaxias (excepto tal vez las mas cercanas) se estan alejando de nosotros. Mas aún, para aquellas galaxias suficientemente cercanas que su distancia puede ser medida, se observa que la velocidad V con que se alejan es proporcional a su distancia d :

$$V = H_0 d. \quad (6.1)$$

Esto se conoce como *ley de Hubble*, donde $H_0 \approx 72 \text{ (Km/s)/Mpc}$ es la constante de Hubble ($1 \text{ pc} = 3.09 \times 10^{16} \text{ m}$, aproximadamente 3.26 años-luz). El alejamiento de todas las galaxias no implica necesariamente que somos el centro del universo. Por el contrario, se asume este fenómeno como una evidencia de la inexistencia de un centro y de la *expansión* del universo. Así, se asume que observadores en cualquier otra galaxia verían exactamente lo mismo que nosotros: todas las galaxias se alejan de él, y el alejamiento está controlado por la misma constante de Hubble. Para hacernos una idea, podemos pensar en la analogía de un universo plano como una plancha de goma que se estira uniformemente en todas las direcciones, con las galaxias siendo puntos fijados a esta superficie; alternativamente podemos pensar en la superficie de un globo de goma que se infla a velocidad constante. En cada una de estas situaciones, cada punto verá alejarse a todos los otros de sí mismo, sin haber ningún "centro" o punto privilegiado del espacio. Mas allá de consideraciones filosóficas, esta hipótesis es consistente con la observación de homogeneidad e isotropía del espacio. Pero en última instancia, la verificación de la validez de la hipótesis reside en la confirmación experimental (formidable hasta el momento) de las consecuencias que se derivan de la misma.

Modelos cosmológicos: el big bang

En base a las observaciones anteriores se propone un modelo para la geometría del universo a gran escala, en el cual se asume que la distribución de energía es uniforme, de manera que podemos pensar el sistema como un fluido de densidad, presión y temperatura constantes espacialmente. La expansión del universo, por otra parte, nos dice que estas cantidades cambian en el tiempo, manteniendo la homogeneidad e isotropía espaciales. Se asume así que, para cada valor de t , el fluido se encuentra en equilibrio termodinámico. El

elemento de línea consistente con estas características adopta entonces la forma ($c = 1$)

$$ds^2 = -dt^2 + a^2(t)d\mathcal{L}^2 \quad (6.2)$$

donde $a(t)$ es una función de la coordenada temporal llamado *factor de escala* y $d\mathcal{L}^2$ es un elemento de línea independiente del tiempo de una geometría *espacial* tridimensional homogénea e isotrópica. El ejemplo más simple es una geometría euclídea plana tridimensional

$$d\mathcal{L}^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2) \quad (6.3)$$

El elemento de línea (6.2) define una familia de modelos cosmológicos conocidos como de *Friedman-Robertson-Walker* (FRW).

Las galaxias en estos modelos pueden pensarse como partículas en este fluido cósmico, cuya localización está descrita por las coordenadas x^i (en el caso (6.3)). La velocidad dx^i/dt debe anularse en este grado de aproximación (recordemos que estamos asumiendo un promedio espacial y temporal a grandes escalas), ya que de otro modo eso podría establecer una dirección preferencial, violando la suposición de isotropía. De acuerdo con esto, las coordenadas (x, y, z) (o las coordenadas espaciales que correspondan de acuerdo a (6.2)) son *comoviles* (como los distintos puntos de un cuerpo rígido): una galaxia individual tiene las mismas coordenadas x^i para cualquier tiempo.

Si $a(t)$ aumenta con el tiempo, el elemento de línea (6.2) describe un universo que se expande. Para ver esto consideremos las líneas de mundo de dos galaxias separadas por intervalos $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ en la geometría (6.3). La distancia coordenada $d_{coord} = ((\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2)^{1/2}$ permanece constante en el tiempo. Pero la distancia física entre ellas a un tiempo t está dada por

$$d(t) = a(t)d_{coord}$$

Si consideramos una galaxia a una distancia coordenada R de nosotros que nos envía señales luminosas de frecuencia ω_e a un tiempo $t = t_e$, las cuales son recibidas por nosotros en un tiempo posterior $t = t_0$ con una frecuencia ω_0 , del análisis de las geodésicas nulas de acuerdo al elemento de línea (6.2)-(6.3) se obtiene que (queda como ejercicio para el lector)

$$\frac{\omega_0}{\omega_e} = \frac{a(t_e)}{a(t_0)} \quad (6.4)$$

En un universo que se expande, la frecuencia con que se reciben todas las señales luminosas es inferior a aquellas con que fueron emitidas. Este es el

corrimiento al rojo cosmológico. Mas aún, para R pequeña y usando la relación para el efecto Doppler $V/c = \Delta\lambda/\lambda$ (donde λ es la longitud de onda), de la relación anterior se deriva la ley de Hubble (6.1) con

$$H_0 = \frac{\dot{a}(t_0)}{a(t_0)} \quad (6.5)$$

donde \dot{a} denota una derivada respecto de t y t_0 es el tiempo actual. Ahora bien, existe alguna otra posibilidad para un espacio homogéneo e isotrópico, además de la métrica plana (6.3)? Notablemente solo existen otras dos posibilidades. Una de ellas es la triesfera, esto es la generalización de una esfera en un espacio euclideo de cuatro dimensiones con coordenadas cartesianas (X, Y, Z, W) , definida por

$$X^2 + Y^2 + Z^2 + W^2 = 1$$

Resulta conveniente para describir este espacio introducir la generalización de las coordenadas polares en cuatro dimensiones (con radio unitario)

$$X = \sin \chi \sin \theta \cos \phi \quad (6.6)$$

$$Y = \sin \chi \sin \theta \sin \phi \quad (6.7)$$

$$Z = \sin \chi \cos \theta \quad (6.8)$$

$$W = \cos \chi \quad (6.9)$$

donde el rango de los ángulos polares es $0 \leq \chi \leq \pi$, $0 \leq \theta \leq \pi$ y $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Reemplazando en el elemento de línea para el espacio euclideo (X, Y, Z, W) :

$$dS^2 = dX^2 + dY^2 + dZ^2 + dW^2$$

obtenemos

$$d\mathcal{L}^2 = d\chi^2 + \sin^2 \chi (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2) \quad (6.10)$$

Esta es la métrica de un espacio curvo tridimensional, homogéneo e isotrópico: la triesfera. Este espacio se dice que es *cerrado*, ya que su volumen es finito y no tiene borde. Es el análogo tridimensional de la superficie de la esfera, que tiene área finita y no tiene borde.

La geometría restante para un espacio tridimensional homogéneo e isotrópico se conoce como *hiperboloide de Lorentz* y es el conjunto de puntos en el espacio euclideo (X, Y, Z, W) que satisfacen la ecuación:

$$-W^2 + X^2 + Y^2 + Z^2 = -1 \quad (6.11)$$

El análogo de las coordenadas polares para este espacio es

$$X = \sinh \chi \sin \theta \cos \phi \quad (6.12)$$

$$Y = \sinh \chi \sin \theta \sin \phi \quad (6.13)$$

$$Z = \sinh \chi \cos \theta \quad (6.14)$$

$$W = \cosh \chi \quad (6.15)$$

donde el rango de las variables es $0 \leq \chi \leq \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$ y $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Cortes bidimensionales de este espacio para X , Y o Z constantes corresponden a hiperboloides de revolución, al igual que cortes de la triesfera corresponden a esferas. El elemento de línea en estas coordenadas resulta

$$d\mathcal{L}^2 = d\chi^2 + \sinh^2 \chi (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2) \quad (6.16)$$

El volúmen de este espacio es infinito y por lo tanto se denomina *abierto*.

Los tres tipos de espacio también pueden ser caracterizados como aquellos espacios en los cuales la curvatura es la misma en cualquier punto.

Introduciendo el cambio de variable $r = \sin \chi$ para el espacio cerrado y $r = \sinh \chi$ para el espacio abierto, podemos resumir las métricas de FRW en una sola expresión como

$$ds^2 = -dt^2 + a^2(t) \left[\frac{dr^2}{1 - kr^2} + r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2) \right] \quad (6.17)$$

donde $k = +1, 0, -1$ corresponde a los espacios cerrado, plano y abierto respectivamente. Vemos que la métrica esta casi enteramente determinada por restricciones de simetría, excepto por el factor de escala $a(t)$. Si se introduce la expresión anterior en las ecuaciones de Einstein para un fluido de densidad de energía y presión uniformes $\rho(t)$ y $p(t)$ se obtienen las siguientes ecuaciones

$$\frac{d(\rho a^3)}{dt} = -p \frac{d(a)^3}{dt} \quad (6.18)$$

$$\dot{a}^2 - \frac{8\pi}{3} \rho a^2 = -k \quad (6.19)$$

donde la relación entre p y ρ viene dada por la ecuación de estado del fluido.

La Ec.(6.18) tiene una interpretación muy directa. Tomemos un pequeño volúmen en el espacio coordinado ΔV_{coord} (por ej., en la métrica plana en

coordenadas cartesianas $\Delta V_{coord} = \Delta x \Delta y \Delta z$ y consideremos un intervalo de tiempo infinitesimal dt . El volumen físico viene dado por $\Delta \mathcal{V} = a^3 \Delta V_{coord}$. ΔV_{coord} es independiente de t , ya que las coordenadas espaciales son comoviles. Así, multiplicando la Ec.(6.18) por ΔV_{coord} obtenemos

$$d(\rho \Delta \mathcal{V}) = d(\Delta E) = -p d(\Delta \mathcal{V})$$

donde ΔE es la energía contenida en $\Delta \mathcal{V}$. El lado derecho de la ecuación anterior es el trabajo realizado al expandirse $\Delta \mathcal{V}$. Si tomamos en cuenta que en equilibrio termodinámico el flujo de calor en todo punto debe ser nulo (de otro modo se generarían inhomogeneidades) la Ec.(6.18) no es mas que la primera ley de la termodinámica. Dada la ecuación de estado del fluido, esta nos permite obtener la densidad en función de a . Por ejemplo, supongamos que solo tenemos materia (galaxias). En general se observa que las galaxias se mueven aleatoriamente con velocidades bastante bajas. Esto hace que la energía cinética de las mismas sea despreciable frente a la energía debida a la masa en reposo. Esto corresponde a un fluido sin presión $p = 0$ (o bien a temperatura nula $T = 0$). De la Ec.(6.18) tenemos que $\rho_m a^3 = cte$ o bien

$$\rho_m(t) = \rho_m(t_0) \frac{a(t_0)^3}{a(t)^3} \quad (6.20)$$

Para el caso de un universo compuesto exclusivamente por radiación, la ecuación de estado para un cuerpo negro nos dice que

$$p_r = \frac{1}{3} \rho_r. \quad (6.21)$$

Reemplazando en la Ec.(6.18) es fácil ver que

$$\rho_r(t) = \rho_r(t_0) \frac{a(t_0)^4}{a(t)^4} \quad (6.22)$$

La Ec.(6.19) se conoce como ecuación de *Friedman*. Antes de resolverla notemos lo siguiente. Si la dividimos por a^2 , la evaluamos en $t = t_0$ (el tiempo actual) y comparamos con la Ec.(6.5) obtenemos

$$H_0^2 - \frac{8\pi}{3} \rho_0 = -\frac{k}{a^2(t_0)}$$

donde $\rho_0 \equiv \rho(t_0)$. Definiendo la densidad crítica

$$\rho_c = \frac{3H_0^2}{8\pi} \quad (6.23)$$

podemos reescribir la ecuación anterior como

$$H_0^2 \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho_c} \right] = -\frac{k}{a^2(t_0)} \quad (6.24)$$

Esta relación implica que, si la densidad actual de energía es $\rho_0 > \rho_c$ el universo es cerrado ($k = +1$); si $\rho_0 < \rho_c$ el universo es abierto ($k = -1$). $\rho_0 = \rho_c$ es el caso límite entre ambas situaciones anteriores y corresponde a un universo plano ($k = 0$). Esta predicción es notable. Determinando solo dos cantidades (H_0 y ρ_0 , ambas accesibles experimentalmente) podemos conocer la geometría del universo! Mas notable aún es el hecho de que toda la evidencia experimental al presente indica que el universo es aproximadamente plano (justamente el caso límite).

Volviendo a la solución de la Ec.(6.19), consideremos el caso de un universo dominado por materia ($\rho = \rho_m$) y tomemos por simplicidad el caso $k = 0$. Reemplazando la Ec.(6.20) en la ecuación de Friedman y usando la normalización $a(t_0) = 1$ obtenemos

$$\dot{a}^2 - \frac{H_0^2}{a} = 0$$

cuya solución es

$$a(t) = \left[1 + \frac{3}{2} H_0 (t - t_0) \right]^{2/3}.$$

Esta solución se anula $a = 0$ para un cierto tiempo t pasado; tomando $t_0 = 2/3H_0$ (lo cual equivale a elegir el origen $t = 0$ como aquel en el cual $a = 0$) la expresión anterior puede escribirse como

$$a(t) = \left(\frac{t}{t_0} \right)^{2/3} \quad (6.25)$$

Para el caso de un universo dominado por radiación $\rho = \rho_r$ se obtiene en forma semejante

$$a(t) = \left(\frac{t}{t_0} \right)^{1/2} \quad (6.26)$$

con $t_0 = 1/2H_0$. Vemos que en ambas situaciones existe un tiempo pasado proporcional a $t_H = 1/H_0$ (conocido como tiempo de Hubble) para el cual el factor de escala se anula. Incluso puede verse que esto sucede para cualquier combinación lineal de densidades de materia y radiación, inclusive en el caso de geometrías curvas ($k \neq 0$). Pero esto corresponde a una densidad y temperaturas

infinitas, es decir, a una singularidad física. Esto es el *Big Bang*. A diferencia de lo que ocurre en un agujero negro, esta singularidad no posee un horizonte de eventos: podemos "ver" hacia atrás toda la evolución hasta llegar a la singularidad. Esta última expresión es bastante literal: el fondo de radiación cósmica que vemos en la actualidad es luz proveniente de los primeros instantes posteriores al big bang.

Como ya hemos mencionado en el caso de agujeros negros, una singularidad representa el límite de validez de la teoría. La propia noción clásica de geometría del espacio-tiempo deja de tener sentido en la singularidad. Mas aún, la densidad y temperatura extremas predichas por la teoría en los primeros instantes posteriores al big bang nos llevan al reino de las partículas de altas energías, reino eminentemente cuántico que, al menos hasta el presente, resulta incompatible con la relatividad general. Por ejemplo, si corremos la película hacia atrás en el tiempo, con la temperatura y la densidad aumentando, llegará un punto en el cual la energía térmica $k_B T$ superará las energías de disociación de moléculas y átomos. Todas las moléculas y átomos resultan ionizados, dando lugar a un plasma de electrones y núcleos. Si continuamos hacia atrás, llegará un punto en el cual los núcleos se disociarán en protones y neutrones. Un poco más y los protones y neutrones se disociarán en quarks y gluones (partículas elementales que los componen), dando lugar a una sopa de partículas elementales infernalmente caliente. Corriendo la película ahora en sentido inverso, pero usando todo el conocimiento presente del modelo standard de partículas elementales, es posible entonces hacer predicciones acerca de que debería observarse en el presente, en mediciones tales como el espectro de radiación electromagnética de fondo, la abundancia relativa de las diferentes partículas elementales, etc. Notablemente todas las predicciones han sido verificadas hasta el presente. Este enorme grado de consistencia en el rompecabezas que involucra gran parte del conocimiento de la física actual, sustenta la enorme aceptación del big bang como explicación del fenómeno natural más alejado de cualquier experiencia humana: el origen del universo.

Un elemento que no hemos tenido en cuenta hasta ahora es la energía del vacío. De hecho, las observaciones indican esta contribución a la energía total es dominante (alrededor del 70%). Si se reemplaza la densidad $\rho = \rho_v = cte$ en la ecuación de Friedman, se obtiene un comportamiento exponencial $a(t) = \exp[H_0(t - t_0)]$, de manera que esta solución no presenta big bang. No obstante, una densidad constante resulta despreciable en un tiempo pasado en el cual las densidades de materia y radiación divergen.

Finalmente veamos que ocurre con las geometrías curvas. En la Fig.6.1 se ejemplifica soluciones típicas de la evolución de $a(t)$ para los universos cerrado y abierto, en el caso dominado por materia $\rho = \rho_m$. En todos los casos

6.1. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

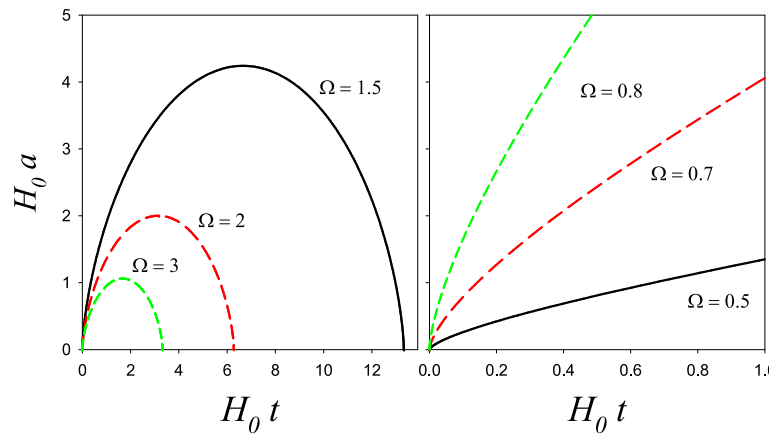


FIGURE 6.1: . Factor de escala para geometrías curvas $k = +1$ (panel izquierdo) y $k = -1$ (panel derecho), en un universo dominado por materia, para diferentes valores de $\Omega \equiv \rho_0/\rho_c$.

existe un big bang. La gran diferencia radica en el comportamiento a tiempos grandes. En el caso de un universo cerrado la expansión presenta un máximo, seguido de una contracción que culmina en una nueva singularidad (llamada "big crunch", o gran colapso). En el caso de un universo abierto la expansión continua indefinidamente, al igual que en el caso plano.

6.1 Bibliografía recomendada

- J. B. Hartle, Gravity: An introduction to Einstein's General Relativity, Addison Wesley (2003).

Parte V

Partículas y Campos

CUANTIZACIÓN DEL CAMPO ELECTROMAGNÉTICO: EL FOTÓN

7.1 Descomposición espectral del campo electromagnético

Consideremos el campo electromagnético dentro una cavidad cubica de lado L y volumen $V = L^3$ vacía de materia. Vamos a considerar por simplicidad condiciones de contorno periódicas

La energía del campo electromagnético en el interior de la cavidad (en sistema MKS) viene dada por:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int_V \left(\epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2 \right) d^3r, \quad (7.1)$$

donde los campos \vec{E} y \vec{B} son funciones de la posición y del tiempo. Los mismos obedecen la ecuaciones de Maxwell en ausencia de fuentes:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (7.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0 \quad (7.3)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (7.4)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (7.5)$$

7.1. DESCOMPOSICIÓN ESPECTRAL DEL CAMPO ELECTROMAGNÉTICO

donde $\epsilon_0\mu_0 = 1/c^2$. Si expresamos los campos en términos del potencial vector \vec{A} y del potencial escalar ϕ como

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad (7.6)$$

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla\phi, \quad (7.7)$$

las ecuaciones (7.2) y (7.5) se satisfacen automáticamente. Como sabemos, los potenciales se encuentran definidos a menos de una transformación de gauge, esto es, si introducimos nuevos potenciales

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} - \nabla\chi \quad \phi \rightarrow \phi + \frac{\partial\chi}{\partial t},$$

donde χ es una función arbitraria, obtenemos exactamente los mismos campos \vec{E} y \vec{B} . Esta arbitrariedad en la definición de \vec{A} nos permite imponer la condición de transversalidad

$$\nabla \cdot \vec{A} = 0, \quad (7.8)$$

conocida como gauge de Coulomb. Dado que no hay cargas en la cavidad podemos tomar $\phi = 0$. Así, la ecuación (7.3) se satisface automáticamente y la Ec.(7.4) nos dá la ecuación de ondas para el potencial vector

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0. \quad (7.9)$$

La solución general de la Ec.(7.9) para la caja con condiciones de contorno periódicas tiene la forma

$$\vec{A} = \sum_{\vec{k}} \left[\vec{a}_{\vec{k}} \exp \left(i\omega(\vec{k})t - i\vec{k} \cdot \vec{r} \right) + c.c. \right], \quad (7.10)$$

donde las componentes del vector de onda vienen dadas por $k_i = 2\pi l_i/L$ con $i = x, y, z$ y $l_i = 0, \pm 1, \pm 2$; la frecuencia satisface la relación de dispersión

$$\omega(\vec{k}) = c|\vec{k}| \quad (7.11)$$

y *c.c.* indica el complejo conjugado del término anterior. Los coeficientes $\vec{a}_{\vec{k}}$ se determinan a partir de las condiciones iniciales. La condición de transversalidad (7.8) implica que

$$\vec{k} \cdot \vec{a}_{\vec{k}} = 0. \quad (7.12)$$

Los campos \vec{E} y \vec{B} vienen dados entonces por

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \sum_{\vec{k}} \left[-ick\vec{a}_{\vec{k}} \exp\left(i\omega(\vec{k})t - i\vec{k}\cdot\vec{r}\right) + c.c. \right] \quad (7.13)$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = \sum_{\vec{k}} \left[i(\vec{k} \times \vec{a}_{\vec{k}}) \exp\left(i\omega(\vec{k})t - i\vec{k}\cdot\vec{r}\right) + c.c. \right]. \quad (7.14)$$

Esto es, tenemos un desarrollo en ondas planas de los campos. Usando la propiedad

$$\int_V \exp\left[i(\vec{k} - \vec{k}')\cdot\vec{r}\right] d^3r = V\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \quad (7.15)$$

es fácil demostrar que

$$\int_V E^2 d^3r = Vc^2 \sum_{\vec{k}} k^2 \left[2\vec{a}_{\vec{k}}\cdot\vec{a}_{\vec{k}}^* - \vec{a}_{\vec{k}}\cdot\vec{a}_{-\vec{k}} \exp\left(2i\omega(\vec{k})t\right) - \vec{a}_{\vec{k}}^*\cdot\vec{a}_{-\vec{k}}^* \exp\left(-2i\omega(\vec{k})t\right) \right] \quad (7.16)$$

De la misma manera usando las propiedades del producto vectorial mixto y la transversalidad de los campos, se puede demostrar que

$$\int_V B^2 d^3r = V \sum_{\vec{k}} k^2 \left[2\vec{a}_{\vec{k}}\cdot\vec{a}_{\vec{k}}^* + \vec{a}_{\vec{k}}\cdot\vec{a}_{-\vec{k}} \exp\left(2i\omega(\vec{k})t\right) + \vec{a}_{\vec{k}}^*\cdot\vec{a}_{-\vec{k}}^* \exp\left(-2i\omega(\vec{k})t\right) \right] \quad (7.17)$$

Por lo tanto tenemos que la energía del campo viene dada por

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int_V \left(\epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2 \right) d^3r = \frac{2V}{\mu_0} \sum_{\vec{k}} k^2 \vec{a}_{\vec{k}}\cdot\vec{a}_{\vec{k}}^* \quad (7.18)$$

la cual no depende del tiempo.

7.1.1 Campo en términos de variables canónicas

La técnica de cuantización habitual consiste en reemplazar en un Hamiltoniano las variables canónicas generalizadas por operadores que satisfacen ciertas relaciones de conmutación. La propuesta de Dirac para la cuantización el campo electromagnético consiste en hacer exactamente lo mismo. Notemos que la expresión (7.18) para la energía no es un Hamiltoniano, ya que la misma no se

7.1. DESCOMPOSICIÓN ESPECTRAL DEL CAMPO ELECTROMAGNÉTICO

encuentra expresada en términos de variables canónicas, esto es, coordenadas y momentos generalizados que satisfagan las ecuaciones de Hamilton.

Definimos entonces las coordenadas generalizadas:

$$\vec{Q}_{\vec{k}}(t) = \alpha \left[\vec{a}_{\vec{k}} \exp(i\omega(\vec{k})t) + \vec{a}_{\vec{k}}^* \exp(-i\omega(\vec{k})t) \right], \quad (7.19)$$

donde α es una constante real a determinar, y los momentos generalizados

$$\vec{P}_{\vec{k}}(t) = \frac{d}{dt} \vec{Q}_{\vec{k}}(t) = \alpha \left[i\omega(\vec{k}) \vec{a}_{\vec{k}} \exp(i\omega(\vec{k})t) - i\omega(\vec{k}) \vec{a}_{\vec{k}}^* \exp(-i\omega(\vec{k})t) \right]. \quad (7.20)$$

De las Ecs.(7.19) y (7.20) podemos expresar

$$\vec{a}_{\vec{k}} = \frac{1}{2\alpha} e^{-i\omega(\vec{k})t} \left(\vec{Q}_{\vec{k}} - \frac{i}{\omega(\vec{k})} \vec{P}_{\vec{k}} \right). \quad (7.21)$$

Reemplazando la Ec.(7.21) en (7.18) tenemos que

$$\mathcal{H} = \frac{V\epsilon_0}{2\alpha^2} \sum_{\vec{k}} \left[\vec{P}_{\vec{k}}^2 + \omega(\vec{k})^2 \vec{Q}_{\vec{k}}^2 \right]. \quad (7.22)$$

Es fácil ver que eligiendo

$$\alpha = \sqrt{V\epsilon_0} \quad (7.23)$$

las coordenadas y momentos generalizados (7.19) y (7.20) satisfacen las ecuaciones de Hamilton:

$$\frac{d}{dt} \vec{Q}_{\vec{k}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{P}_{\vec{k}}} \quad \frac{d}{dt} \vec{P}_{\vec{k}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{Q}_{\vec{k}}} \quad (7.24)$$

Es importante notar que la transversalidad de los campos impone que

$$\vec{Q}_{\vec{k}} \cdot \vec{k} = \vec{P}_{\vec{k}} \cdot \vec{k} = 0; \quad (7.25)$$

esto es, los vectores $\vec{Q}_{\vec{k}}$ y $\vec{P}_{\vec{k}}$ son normales a la dirección de propagación de la onda dada por el vector \vec{k} , y por lo tanto el Hamiltoniano (7.22) puede escribirse como

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},j} \left[P_{\vec{k},j}^2 + \omega(\vec{k})^2 Q_{\vec{k},j}^2 \right] = \sum_{\vec{k},j} H_{\vec{k},j} \quad (7.26)$$

donde $P_{\vec{k},j}$ y $Q_{\vec{k},j}$ son las componentes de $\vec{P}_{\vec{k}}$ y $\vec{Q}_{\vec{k}}$ en la dirección de los versores de polarización lineal $\vec{\epsilon}_j(\vec{k})$ con $j = 1, 2$, los cuales satisfacen $\vec{\epsilon}_1(\vec{k}) \cdot \vec{\epsilon}_2(\vec{k}) = 0$ y $\vec{\epsilon}_j(\vec{k}) \cdot \vec{k} = 0$.

7.2 El gas de fotones

7.2.1 El oscilador armónico

El Hamiltoniano de un oscilador armónico simple de masa $m = 1$ es

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2 q^2 \quad (7.27)$$

donde los operadores p y q satisfacen la relación de conmutación $[q, p] = i\hbar$. Introducimos los operadores

$$a = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left(q + i\frac{p}{\omega} \right) \quad (7.28)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} \left(q - i\frac{p}{\omega} \right) \quad (7.29)$$

que satisfacen la relación de conmutación

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (7.30)$$

En términos de los operadores a y a^\dagger el Hamiltoniano (7.27) resulta

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (7.31)$$

El operador $N \equiv a^\dagger a$ es claramente positivo. Sea $|\psi_n\rangle$ un autovector del operador N con autovalor λ_n :

$$N |\psi_n\rangle = \lambda_n |\psi_n\rangle$$

Tenemos que

$$\langle \psi_n | N | \psi_n \rangle = \lambda_n \langle \psi_n | \psi_n \rangle = \langle a \psi_n | a \psi_n \rangle$$

de donde $\lambda_n \geq 0$. Además

$$N a^\dagger |\psi_n\rangle = a^\dagger (a^\dagger a + 1) |\psi_n\rangle = (\lambda_n + 1) a^\dagger |\psi_n\rangle,$$

7.2. EL GAS DE FOTONES

de manera que $a^\dagger |\psi_n\rangle$ es un autovector de N con autovalor $(\lambda_n + 1)$. De la misma manera se obtiene que $a |\psi_n\rangle$ es autovector de N con autovalor $(\lambda_n - 1)$. Dado que $\lambda_n \geq 0$ se concluye que el estado fundamental $|\psi_0\rangle$ corresponde a $\lambda_0 = 0$, donde

$$a |\psi_0\rangle = 0$$

y todos los autovalores son enteros $\lambda_n = n$, con $n = 0, 1, 2, \dots$. Adoptando la notación $|\psi_n\rangle \equiv |n\rangle$, si imponemos la normalización $\langle n|n\rangle = 1$ para todo n , es fácil demostrar las siguientes propiedades

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

de donde

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$$

Estos son también los autoestados del Hamiltoniano (7.31) correspondientes a los autovalores

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

Los operadores a^\dagger y a se denominan operadores de *creación* y *aniquilación* respectivamente, ya que "crean" o "destruyen" un quantum de energía $\hbar\omega$.

Hasta acá hemos trabajado en la representación de Schrödinger, en un instante particular. En la representación de Heisenberg y asumiendo que ambas representaciones coinciden en $t = 0$, los operadores a y a^\dagger dependen del tiempo y satisfacen la ecuación de movimiento

$$i\hbar \frac{da(t)}{dt} = [a(t), H] \quad (7.32)$$

donde $a(0) = a$, el operador aniquilación que hemos considerado en la representación anterior. Dado que los operadores $a(t)$ y $a^\dagger(t)$ satisfacen las mismas relaciones de conmutación que a y a^\dagger , tenemos que

$$\frac{da(t)}{dt} = -i\omega a(t) \quad (7.33)$$

cuya solución es

$$a(t) = a e^{-i\omega t} \quad (7.34)$$

7.2.2 Cuantización del campo electromagnético

En 1928 P. Dirac sugirió que el campo electromagnético podía ser cuantizado tratando las variables canónicas clásicas $Q_{\vec{k},j}$ y $P_{\vec{k},j}$ como operadores que obedecen las relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [Q_{\vec{k},j}, P_{\vec{k}',j'}] &= i\hbar\delta_{\vec{k},\vec{k}'}\delta_{j,j'} \\ [Q_{\vec{k},j}, Q_{\vec{k}',j'}] &= [P_{\vec{k},j}, P_{\vec{k}',j'}] = 0. \end{aligned}$$

A partir de los resultados de la sección anterior introducimos los operadores de creación y aniquilación:

$$a_{\vec{k},j} = \sqrt{\frac{\omega(\vec{k})}{2\hbar}} \left(Q_{\vec{k},j} + i \frac{P_{\vec{k},j}}{\omega(\vec{k})} \right) \quad (7.35)$$

$$a_{\vec{k},j}^\dagger = \sqrt{\frac{\omega(\vec{k})}{2\hbar}} \left(Q_{\vec{k},j} - i \frac{P_{\vec{k},j}}{\omega(\vec{k})} \right) \quad (7.36)$$

los cuales satisfacen las relaciones de conmutación

$$[a_{\vec{k},j}, a_{\vec{k}',j'}^\dagger] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}\delta_{j,j'} \quad (7.37)$$

$$[a_{\vec{k},j}^\dagger, a_{\vec{k}',j'}^\dagger] = [a_{\vec{k},j}, a_{\vec{k}',j'}] = 0. \quad (7.38)$$

Reemplazando entonces en el Hamiltoniano (7.26) se obtiene el Hamiltoniano cuantizado:

$$H = \sum_{\vec{k},j} \hbar\omega(\vec{k}) \left(a_{\vec{k},j}^\dagger a_{\vec{k},j} + \frac{1}{2} \right), \quad (7.39)$$

Los operadores $N_j(\vec{k}) = a_{\vec{k},j}^\dagger a_{\vec{k},j}$ se denominan operadores *número de ocupación*, tienen autovalores $n_j(\vec{k}) = 0, 1, 2, \dots$ y autoestados de la forma

$$|n_j(\vec{k})\rangle = \frac{[a_{\vec{k},j}^\dagger]^{n_j(\vec{k})}}{\sqrt{n_j(\vec{k})!}} |0\rangle. \quad (7.40)$$

Los autoestados del Hamiltoniano de radiación (7.39) son productos de tales estados, esto es,

$$|\dots n_j(\vec{k}) \dots\rangle = \prod_{\vec{k},j} |n_j(\vec{k})\rangle, \quad (7.41)$$

con autoenergías

$$\sum_{\vec{k},j} \hbar\omega(\vec{k}) \left(n_j(\vec{k}) + \frac{1}{2} \right).$$

Es posible mostrar que el operador momento lineal del campo electromagnético resulta

$$\vec{P} = \sum_{\vec{k},j} \hbar\vec{k} N_j(\vec{k}) \quad (7.42)$$

La interpretación de estos resultados en términos de partículas de energía $\hbar\omega(\vec{k})$ y momento lineal $\hbar\vec{k}$, esto es fotones, es directa. Un estado con autovalor $n_j(\vec{k})$ posee $n_j(\vec{k})$ fotones con energía $\hbar\omega(\vec{k})$ y momento lineal $\hbar\vec{k}$. La relación de dispersión $\omega(\vec{k}) = c|\vec{k}|$ resulta consistente con partículas de masa en reposo nula que viajan a la velocidad c . Mas aún, un análisis detallado del momento angular del campo electromagnético, muestra que los fotones son partículas de spin 1, solo que la componente de $S_z = 0$ no es observable debido al caracter transversal de los campos. Esto resulta consistente con el hecho de que un estado de una partícula correspondiente a un modo (\vec{k}, j) del campo puede estar ocupado por un número arbitrario de fotones: los fotones son *bosones*.

Recorriendo las cuentas hacia atrás, queda claro que todo el proceso de cuantización puede llevarse a cabo directamente reemplazando las amplitudes clásicas a^* y a en el desarrollo espectral de los campos clásicos por operadores de creación y aniquilación, con una normalización adecuada. Así, trabajando en la representación de Heisenberg, podemos definir el operador potencial vector como

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}^{(+)}(\vec{r}, t) + \vec{A}^{(-)}(\vec{r}, t), \quad (7.43)$$

donde

$$\vec{A}^{(+)}(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0}} \sum_{\vec{k},j} \frac{1}{\sqrt{\omega(\vec{k})}} \vec{e}_j(\vec{k}) a_{\vec{k},j} e^{i\omega(\vec{k})t - i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (7.44)$$

y $\vec{A}^{(-)}(\vec{r}, t) = [\vec{A}^{(+)}(\vec{r}, t)]^\dagger$ se denominan la parte de frecuencia positiva y negativa respectivamente del campo. La misma descomposición puede hacerse en el

desarrollo de Fourier de los campos clásicos. Es simple ver que este operador satisface el gauge de Coulomb y la ecuación de ondas correspondiente (7.9). Los operadores de campo eléctrico y magnético siguen estando definidos a través de las relaciones $\vec{E} = -\partial\vec{A}/\partial t$ y $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$. De esta manera tenemos, por ejemplo,

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}^{(+)}(\vec{r}, t) + \vec{E}^{(-)}(\vec{r}, t), \quad (7.45)$$

con

$$\vec{E}^{(+)}(\vec{r}, t) = -i\sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0}} \sum_{\vec{k}} \sqrt{\omega(\vec{k})} \left[\vec{\epsilon}_1(\vec{k}) a_{\vec{k},1} + \vec{\epsilon}_2(\vec{k}) a_{\vec{k},2} \right] e^{i\omega(\vec{k})t - i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (7.46)$$

de donde

$$\vec{\epsilon}_1(\vec{k}) a_{\vec{k},1} + \vec{\epsilon}_2(\vec{k}) a_{\vec{k},2} = i\sqrt{\frac{2\epsilon_0}{V\hbar\omega(\vec{k})}} \int_V e^{-i(\omega(\vec{k})t - \vec{k}\cdot\vec{r})} \vec{E}^{(+)}(\vec{r}, t) d^3r$$

Si consideramos el Hamiltoniano del sistema de fotones

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\vec{k}} \hbar\omega(\vec{k}) \left(a_{\vec{k},1}^\dagger a_{\vec{k},1} + a_{\vec{k},2}^\dagger a_{\vec{k},2} \right) \\ &= \sum_{\vec{k}} \hbar\omega(\vec{k}) \left[\vec{\epsilon}_1(\vec{k}) a_{\vec{k},1}^\dagger + \vec{\epsilon}_2(\vec{k}) a_{\vec{k},2}^\dagger \right] \cdot \left[\vec{\epsilon}_1(\vec{k}) a_{\vec{k},1} + \vec{\epsilon}_2(\vec{k}) a_{\vec{k},2} \right], \end{aligned} \quad (7.47)$$

donde hemos descartado la constante $\sum_{\vec{k},j} \hbar\omega(\vec{k})/2$ (ya que no tiene ninguna influencia en la dinámica del problema), obtenemos

$$H = 2\epsilon_0 \int_V \vec{E}^{(-)}(\vec{r}, t) \cdot \vec{E}^{(+)}(\vec{r}, t) d^3r \quad (7.48)$$

Exactamente el mismo resultado se obtiene para el campo electromagnético clásico si el campo eléctrico se descompone en las partes de frecuencia positiva y negativa (queda como ejercicio para el lector). De la misma manera, a partir de la Ec.(7.42) se obtiene que

$$\vec{P} = 2\epsilon_0 \int_V \vec{E}^{(-)}(\vec{r}, t) \times \vec{B}^{(+)}(\vec{r}, t) d^3r \quad (7.49)$$

que se corresponde con la versión clásica del momento lineal del campo.

La cuantización del momento angular del campo electromagnético es bastante mas complicada que los ejemplos anteriores. Sin embargo, una

justificación de las propiedades antes enunciadas puede hacerse mediante el siguiente argumento.

El spin \vec{S} de una partícula con masa puede definirse como su momento angular en un sistema de referencia en la cual la misma se encuentra en reposo. En tal sistema el momento angular orbital $\vec{L} = 0$ y por lo tanto el momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{S}$. Esta definición es inaplicable en el caso de una partícula sin masa, la cual se mueve a la velocidad de la luz en cualquier sistema de referencia. No obstante, es posible definir la componente del spin en la dirección de propagación. Esto es, si la partícula se mueve en la dirección z , la componente z del momento angular orbital $L_z = xp_y - yp_x = 0$ y por lo tanto $J_z = S_z$. En mecánica cuántica la componente J_z del momento angular esta dada por

$$J_z = i\hbar \lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{U_z(\phi) - 1}{\phi} \quad (7.50)$$

donde $U_z(\phi)$ es el operador que me rota el sistema un ángulo ϕ alrededor del eje z . Consideremos un modo con $\vec{k} = (0, 0, k)$ y vectores de polarización lineal ϵ_j , $j = 1, 2$. Una rotación alrededor del eje z transforma las amplitudes (operadores) de acuerdo con

$$\begin{pmatrix} a'_1 \\ a'_2 \end{pmatrix} = U_z(\phi) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (7.51)$$

Tenemos que

$$\lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{U_z(\phi) - 1}{\phi} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.52)$$

y por lo tanto

$$J_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (7.53)$$

Los autovectores de J_z/\hbar son

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$$

con autovalores $+1$ y -1 respectivamente. Por lo tanto, el fotón se comporta como una partícula de spin 1, con solo dos estados de spin, uno alineado y el otro antialineado con la dirección de movimiento. Clásicamente los autovectores anteriores corresponden a ondas polarizadas circularmente a derecha e izquierda respectivamente.

7.2.3 Fluctuaciones del vacío

Notemos que el valor medio de cualquiera de los campos (eléctrico o magnético) es cero en un estado con un número bien definido de fotones (7.41) (autoestado de los operadores número de ocupación $N_j(\vec{k})$), debido a la dependencia lineal en los operadores creación y aniquilación. No obstante, las fluctuaciones de los campos no son nulas. Consideremos por simplicidad el caso de un único modo del campo eléctrico correspondiente a un vector de onda \vec{k} y una polarización $\vec{\epsilon}$

$$\vec{E} = -i\vec{\epsilon}\sqrt{\frac{\hbar\omega(\vec{k})}{2V\epsilon_0}} \left(a_{\vec{k}} e^{i\omega(\vec{k})t - i\vec{k}\cdot\vec{r}} - a_{\vec{k}}^\dagger e^{-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right). \quad (7.54)$$

Claramente $\langle n(\vec{k}) | \vec{E} | n(\vec{k}) \rangle = 0$, pero

$$\begin{aligned} \langle \vec{E}^2 \rangle &= \langle n(\vec{k}) | \vec{E}^2 | n(\vec{k}) \rangle = \frac{\hbar\omega(\vec{k})}{2V\epsilon_0} \langle n(\vec{k}) | (a_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger + a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}) | n(\vec{k}) \rangle \\ &= \frac{\hbar\omega(\vec{k})}{V\epsilon_0} \langle n(\vec{k}) | (N(\vec{k}) + 1/2) | n(\vec{k}) \rangle \\ &= \frac{\hbar\omega(\vec{k})}{V\epsilon_0} (n(\vec{k}) + 1/2) \end{aligned} \quad (7.55)$$

y las fluctuaciones $\Delta E \equiv \sqrt{\langle \vec{E}^2 \rangle - \langle \vec{E} \rangle^2}$ resultan

$$\Delta E = \sqrt{\frac{\hbar\omega(\vec{k})}{V\epsilon_0}} \sqrt{(n(\vec{k}) + 1/2)}.$$

Un estado con un número bien definido de fotones no tiene un valor definido de los campos electromagnéticos y, como veremos en seguida, un estado con valores bien definidos de los campos electromagnéticos no tiene un número bien definido de fotones. Esto es consecuencia de que los operadores de los campos electromagnéticos no conmutan con los operadores número de ocupación.

Notemos que aún en el estado vacío $n(\vec{k}) = 0$ las fluctuaciones de los campos no son nulas

$$\Delta E = \sqrt{\frac{\hbar\omega(\vec{k})}{2V\epsilon_0}}. \quad (7.56)$$

Estas son las llamadas *fluctuaciones del vacío* y están asociadas a la energía de punto cero o energía del vacío

$$\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, j} \hbar \omega(\vec{k})$$

Las fluctuaciones del vacío y la energía de punto cero representan un problema importante para la teoría cuántica de campos: el universo contiene un número infinito de modos de radiación y por lo tanto la suma anterior es divergente, a menos que por algún motivo los modos de alta frecuencia puedan ser excluidos. En las teorías no relativistas una constante aditiva a la energía no resulta relevante, ya que solo las diferencias de energía cuentan en la dinámica. Sin embargo, en relatividad toda energía cuenta, no solo las diferencias. De hecho, en los modelos cosmológicos la energía del vacío juega un rol fundamental. Mas aún, las fluctuaciones del vacío y la energía del vacío dan lugar a otros efectos observables, tales como la emisión espontánea (que veremos mas adelante) y el llamado efecto Casimir.

7.2.4 Estados coherentes

A menudo se sugiere que el límite clásico del campo cuantizado es el límite en que el número de fotones se vuelve muy grande, de manera que los operadores número pueden considerarse variables continuas. Esta afirmación no es del todo correcta, ya que como vimos el valor medio de los campos es cero en un estado con un número bien definido de fotones, no importa cuan grande sea este valor. A fin de obtener un valor de expectación no nulo del operador campo eléctrico (o equivalentemente, de los operadores de creación y aniquilación), debemos considerar superposiciones de estados cuyos números de fotones difieran en ± 1 . Consideremos por simplicidad un único modo del campo electromagnético y vamos a omitir los subíndices \vec{k} y j (es decir, consideramos un oscilador armónico simple de frecuencia ω , y operadores asociados a , a^\dagger y $N = a^\dagger a$). Un estado posible como el mencionado arriba sería

$$|\psi\rangle = p|n\rangle + q|n \pm 1\rangle$$

y en general una superposición arbitraria de todos los autoestados $|n\rangle$ nos va a dar un valor de expectación no nulo para el operador a . Hemos visto que los campo clásicos se obtienen de las expresiones de los operadores de campo reemplazando directamente los operadores a y a^\dagger por amplitudes clásicas a y a^* . Una manera directa de efectuar ese reemplazo es considerar autoestados del operador a . Estos se denominan *estados coherentes* y se denotan por $|\alpha\rangle$, donde α es el autovalor (dado que el operador a no es hermitiano, en principio α no tiene porque ser real). Esto es

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle.$$

Los estados $|\alpha\rangle$ son a su vez los autoestados "a izquierda" del operador creación con autovalor α^* , esto es

$$\langle\alpha|a^\dagger = \langle\alpha|\alpha^*$$

Si desarrollamos $|\alpha\rangle$ en la base de autoestados $|n\rangle$

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle$$

tenemos que

$$a|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \alpha \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle.$$

Igualando coeficientes obtenemos $C_n \sqrt{n} = \alpha C_{n-1}$, de donde

$$C_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} C_0$$

y así

$$|\alpha\rangle = C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$

Normalizando $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ obtenemos $C_0 = \exp(-|\alpha|^2/2)$ y así llegamos a la expresión final

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (7.57)$$

Consideremos ahora el valor de expectación del operador campo electrico (7.54)

$$\begin{aligned} \langle\alpha_{\vec{k}}|\vec{E}|\alpha_{\vec{k}}\rangle &= -i\vec{\epsilon}\sqrt{\frac{\hbar\omega(\vec{k})}{2V\epsilon_0}} \left(\alpha_{\vec{k}} e^{i\omega(\vec{k})t - i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \alpha_{\vec{k}}^* e^{-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k}\cdot\vec{r}} \right) \\ &= 2\vec{\epsilon}|\alpha_{\vec{k}}|\sqrt{\frac{\hbar\omega(\vec{k})}{2V\epsilon_0}} \sin\left(\omega(\vec{k})t - \vec{k}\cdot\vec{r} + \theta_{\vec{k}}\right) \end{aligned} \quad (7.58)$$

7.2. EL GAS DE FOTONES

donde $\alpha_{\vec{k}} = |\alpha_{\vec{k}}| e^{i\theta_{\vec{k}}}$. Este es el comportamiento esperado para un campo clásico. Mas aún, puede verse que

$$\langle \alpha_{\vec{k}} | \vec{E}^2 | \alpha_{\vec{k}} \rangle = \frac{\hbar\omega(\vec{k})}{2V\epsilon_0} \left[1 + 4|\alpha_{\vec{k}}|^2 \sin^2 \left(\omega(\vec{k})t - \vec{k} \cdot \vec{r} + \theta_{\vec{k}} \right) \right],$$

de donde las fluctuaciones resultan

$$\Delta \vec{E} = \sqrt{\frac{\hbar\omega(\vec{k})}{2V\epsilon_0}}.$$

Esto es, las fluctuaciones en un estado coherente resultan idénticas a las del vacío. En un estado coherente el valor de expectación de los campos es el clásico y las fluctuaciones respecto del mismo son mínimas.

De la Ec.(7.58) vemos que $|\alpha|$ esta relacionada con la intensidad del campo eléctrico. Es facil ver que

$$\bar{N} = \langle \alpha | N | \alpha \rangle = |\alpha|^2$$

esto es, $|\alpha|^2$ nos da el número medio de fotones en el campo. Las fluctuaciones en el número de fotones resultan

$$\Delta N = (\bar{N})^{1/2}$$

resultado característico de un proceso de Poisson. De hecho, en una medición del número de fotones del campo, la probabilidad de detectar n fotones es

$$P_n = |\langle n | \alpha \rangle|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = e^{-\bar{N}} \frac{\bar{N}^n}{n!},$$

esto es, un proceso de Poisson con media \bar{N} . Notemos que la incerteza relativa en el número de fotones es

$$\frac{\Delta N}{\bar{N}} = \frac{1}{\sqrt{\bar{N}}}$$

la cual decrece con \bar{N} .

Puede verse que los estados del campo electromagnético generados por corrientes eléctricas clásicas oscilantes son estados coherentes.

7.3 Emisión y absorción de radiación por átomos

Vamos a considerar ahora un ejemplo simple de interacción entre partículas cargadas y el campo electromagnético cuantizado: un átomo con un electrón ligado que interactúa con un campo de radiación.

7.3.1 Interacción dipolar

El Hamiltoniano de un electrón ligado a un átomo en ausencia de campos externos viene dado por

$$H_{\text{atomo}} = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + V(r) \quad (7.59)$$

donde $V(r)$ es el potencial coulombiano que liga el electrón al núcleo, $r = |\vec{r}|$ y $\vec{P} = -i\hbar\nabla$. En presencia de un campo electromagnético externo, descrito por potenciales $\Phi(\vec{r}, t)$ y $\vec{A}(\vec{r}, t)$ el Hamiltoniano adopta la forma

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{P} + e\vec{A}(\vec{r}, t) \right]^2 + V(r) - e\Phi(\vec{r}, t) \quad (7.60)$$

donde $-e$ es la carga del electrón (estamos considerando la constante e positiva). Los campos eléctrico y magnético vienen dados por

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (7.61)$$

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} - \nabla\Phi(\vec{r}, t) \quad (7.62)$$

Vamos a aprovechar la libertad de gauge para simplificar el Hamiltoniano que describe la interacción entre el electrón y los campos. Sabemos que los campos resultan invariantes ante la transformación

$$\vec{A}'(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}, t) + \nabla\chi(\vec{r}, t) \quad (7.63)$$

$$\Phi'(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}, t) - \frac{\partial\chi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (7.64)$$

Sea $\Psi(\vec{r}, t)$ la función de onda del electrón y sea R una transformación unitaria tal que $\Psi'(\vec{r}, t) = R\Psi(\vec{r}, t)$. La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$H\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

resulta invariante ante esta transformación, esto es,

7.3. EMISIÓN Y ABSORCIÓN DE RADIACIÓN POR ÁTOMOS

$$H'\Psi'(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi'(\vec{r}, t)}{\partial t},$$

si

$$H' = RHR^\dagger + i\hbar \frac{\partial R}{\partial t} R^\dagger.$$

Si elegimos

$$R = \exp(-ie\chi(\vec{r}, t)/\hbar)$$

puede verse que

$$H' = \frac{1}{2m} \left[\vec{P} + e\vec{A}'(\vec{r}, t) \right]^2 + V(r) - e\Phi'(\vec{r}, t) \quad (7.65)$$

donde \vec{A}' y Φ' vienen dadas por las Ecs.(7.63) y (7.64).

Si no hay fuentes de radiación cerca del átomo podemos elegir el gauge de Coulomb $\Phi = 0$ y $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, de manera que \vec{A} satisface la ecuación de ondas (7.9) cuyas soluciones vienen dadas por (7.43)-(7.44).

Supongamos que sobre el átomo incide radiación de longitudes de onda en el rango del visible. Para dimensiones atómicas típicas (unos pocos Angstroms) y longitudes ópticas típicas (4000-7000 Å) los factores de fase de las ondas $\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1$, de manera que podemos aproximar

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \approx 1.$$

Así, sobre la extensión del átomo podemos considerar el potencial vector aproximadamente uniforme $\vec{A}(\vec{r}, t) \approx \vec{A}(t)$. Esta se conoce como *aproximación dipolar*. De hecho, la aproximación dipolar también resulta válida en la emisión γ en núcleos, para los cuales $r \sim 10^{-15}$ m y $\lambda \sim 10^{-12}$ m.

Elegimos ahora la función de gauge $\chi(\vec{r}, t) = -\vec{A}(t) \cdot \vec{r}$. Con esta elección tenemos de las Ecs.(7.63) y (7.64) que

$$\vec{A}'(\vec{r}, t) = 0 \quad (7.66)$$

$$\Phi'(\vec{r}, t) = -\frac{\partial \chi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \vec{r} \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\vec{r} \cdot \vec{E}(t). \quad (7.67)$$

Así

$$H' = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + V(r) + e\vec{r} \cdot \vec{E}(t), \quad (7.68)$$

donde hemos conseguido desacoplar el término de interacción. $\vec{d} = -e\vec{r}$ es el momento dipolar eléctrico del electrón. El Hamiltoniano entonces puede escribirse como

$$H' = H_{atomo} + H_{dip}$$

donde $H_{dip} = -\vec{d} \cdot \vec{E}(t)$ y H_{atomo} es el Hamiltoniano en ausencia de campos (7.59).

7.3.2 Interacción de un átomo con un campo cuantizado

La derivación hecha para la aproximación dipolar es válida tanto para el tratamiento clásico como cuántico del campo electromagnético. En ambos casos el tratamiento del problema de absorción o emisión de radiación por parte del átomo se basa en el uso de teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. En dicho tratamiento se calcula la probabilidad de transición por unidad de tiempo inducida por el Hamiltoniano dipolar de un estado inicial a un estado final del sistema. Esta probabilidad resulta proporcional al elemento de matriz H_{dip} (considerado como una perturbación) entre dichos estados, los cuales son autoestados de sistema no perturbado. La diferencia fundamental entre el tratamiento clásico (aproximación semi-clásica) y cuántico del campo radica en qué consideramos el sistema no perturbado. En el caso clásico el campo $\vec{E}(t)$ en H_{dip} es simplemente una función del tiempo y los estados del sistema son los autoestados $|k\rangle$ de H_{atomo} (Ec.(7.59)), es decir, las autofunciones del átomo hidrogenoide. En el caso de un campo cuantizado, el sistema no perturbado esta constituido por los autoestados del átomo y el campo de radiación, esto es, el gas de fotones. Así, el Hamiltoniano no perturbado está dado por

$$H_0 = H_{atomo} + H_{rad}$$

donde H_{rad} está dado por la Ec.(7.39). Los autoestados inicial y final son entonces el producto de autoestados de H_{atomo} y H_{rad} . El operador dipolar \vec{d} opera sobre el espacio de estados del primero, mientras que el operador campo eléctrico opera sobre los estados del segundo.

El tratamiento detallado del caso de campos clásicos, así como la aplicación de la teoría de perturbaciones se llevará a cabo cuando se analicen los fundamentos del LASER. En esta sección nos vamos a restringir al análisis de los elementos de matriz de H_{dip} en el caso de la electrodinámica cuántica y sus consecuencias principales.

Consideremos un haz de radiación monocromática (proveniente por ejemplo de un laser), es decir, un único modo del campo eléctrico de frecuencia ω y polarización \vec{e}

7.3. EMISIÓN Y ABSORCIÓN DE RADIACIÓN POR ÁTOMOS

$$\vec{E}(t) = -i\vec{\epsilon}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2V\epsilon_0}} \left(a e^{i\omega t} - a^\dagger e^{-i\omega t} \right). \quad (7.69)$$

donde ya hemos aplicado la aproximación dipolar. Este operador se encuentra en la representación de Heisenberg, pero vamos a trabajar en la de Schrödinger, en la cual el operador de campo viene dado por

$$\vec{E} = -i\vec{\epsilon}\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2V\epsilon_0}} \left(a - a^\dagger \right). \quad (7.70)$$

El Hamiltoniano del campo viene dado por

$$H_{rad} = \hbar\omega a^\dagger a$$

donde hemos omitido el término de energía de punto cero. El Hamiltoniano de interacción entre el átomo y el campo resulta

$$H_{dip} = \vec{d} \cdot \vec{E}_0 \left(a - a^\dagger \right) \quad (7.71)$$

donde

$$\vec{E}_0 = i \left(\frac{\hbar\omega}{2V\epsilon_0} \right)^{1/2} \vec{\epsilon}$$

Supongamos que el estado inicial del átomo es $|l\rangle$ y que el campo tiene inicialmente n fotones. El estado inicial del sistema es por lo tanto $|i\rangle = |l\rangle |n\rangle$. La interacción dipolar puede causar una transición a un estado final $|f_1\rangle = |m\rangle |n-1\rangle$, donde $|m\rangle$ es otro estado atómico, mediante la absorción de un fotón, o una transición al estado $|f_2\rangle = |m\rangle |n+1\rangle$ mediante la emisión de un fotón. Las energías de estos estados son

$$\begin{array}{lll} \text{para} & |i\rangle = |l\rangle |n\rangle, & E_i = E_l + n\hbar\omega \\ \text{para} & |f_1\rangle = |m\rangle |n-1\rangle, & E_{f_1} = E_m + (n-1)\hbar\omega \\ \text{para} & |f_2\rangle = |m\rangle |n+1\rangle, & E_{f_2} = E_m + (n+1)\hbar\omega \end{array}$$

Recordando que $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ y $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$, los elementos de matriz de la interacción dipolar resultan por lo tanto, para la absorción

$$\begin{aligned} \langle f_1 | H_{dip} | i \rangle &= \langle m, n-1 | H_{dip} | l, n \rangle \\ &= (\vec{d} \cdot \vec{E}_0)_{ml} \sqrt{n} \end{aligned} \quad (7.72)$$

y para la emisión

$$\begin{aligned}\langle f_2 | H_{dip} | i \rangle &= \langle m, n + 1 | H_{dip} | l, n \rangle \\ &= (\vec{d} \cdot \vec{E}_0)_{ml} \sqrt{n + 1}\end{aligned}\quad (7.73)$$

donde

$$(\vec{d} \cdot \vec{E}_0)_{ml} \equiv \langle m | \vec{d} | l \rangle \cdot \vec{E}_0$$

siendo $\langle m | \vec{d} | l \rangle$ el elemento de matriz del operador dipolar entre los estados atómicos $|l\rangle$ y $|m\rangle$.

En ausencia de fotones $n = 0$, la probabilidad de absorción es cero, como era de esperar. Esto es igual que en la aproximación semi-clásica: sin campo externo no hay transición. En el caso de emisión, no obstante, podemos tener una transición aún en ausencia de fotones. Este fenómeno no tiene contrapartida semi-clásica. El mismo se denomina *emisión espontánea* y está asociado a las fluctuaciones del vacío, siendo responsable de la mayor parte de la luz visible que observamos. Si $n > 0$, la emisión de un fotón adicional se denomina *emisión estimulada*, siendo este proceso esencial para la operación del LASER.

7.4 Bibliografía recomendada

- *Notas de Mecánica Estadística*, S. Cannas, Editorial de la Universidad Nacional de Córdoba (2013).
- *Quantum Field Theory*, F. Mandl and G. Shaw, John Wiley and Sons (1986).
- *An introduction to the Standard Model of Particle Physics*, W. N. Cottingham and D. A. Greenwood, Cambridge University Press (1998).
- *Introductory Quantum Optics*, C. C. Gerry and P. L. Knight, Cambridge University Press (2005).

7.4. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

CAPÍTULO 8

TEORÍA DE DIRAC: EL POSITRÓN

8.1 Ecuación de Dirac

La mecánica cuántica descrita por la ecuación de Schrödinger resulta incompatible con la teoría de la relatividad especial. Consideremos la ecuación de Schrödinger para un electrón en un campo electromagnético¹:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi \quad (8.1)$$

donde

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 - e\phi(\vec{r}) \quad (e > 0) \quad (8.2)$$

y

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

Esta ecuación no es invariante ante transformaciones de Lorentz, como es evidente si analizamos el caso de una partícula libre $H = p^2/2m$. Este capítulo trata entonces acerca del desarrollo de una teoría cuántica relativista para el electrón, la cual fue llevada a cabo exitosamente por P. Dirac en 1928.

¹Especificado por el potencial vector \vec{A} y el potencial escalar ϕ .

8.1.1 Cuantización

Comencemos con una partícula libre. La idea de Dirac fue aplicar las reglas de cuantización canónicas, esto es, reemplazar variables clásicas por operadores de acuerdo con $E \rightarrow i\hbar\partial/\partial t$ y $\vec{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$, a la expresión relativista para la energía:

$$E = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}. \quad (8.3)$$

Un primer intento podría ser la ecuación

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \sqrt{m^2c^4 - (\hbar c)^2\nabla^2} \psi; \quad (8.4)$$

Inmediatamente nos encontramos con el problema de interpretar el operador raíz cuadrada en el lado derecho de la ecuación. Si desarrollamos la raíz obtendremos una ecuación que contiene todas las potencias del operador gradiente y por lo tanto una teoría no local. Una alternativa consiste en tomar el cuadrado de la Ec.(8.3)

$$E^2 = m^2c^4 + c^2p^2$$

de donde obtenemos la ecuación de ondas

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2\right)\psi = \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\psi \quad (8.5)$$

que se conoce como ecuación de Klein-Gordon. Si bien en la actualidad se utiliza como modelo para ciertas partículas elementales, las soluciones de esta ecuación presentan ciertas dificultades conceptuales, por lo cual fue desconsiderada en la época como modelo para el electrón.

Dirac decide entonces mantener la derivada primera temporal, así como derivadas primeras espaciales. Esto es, utilizar la ecuación (8.1), con una expresión para el Hamiltoniano tal que "elevada al cuadrado" reproduzca $E^2 = m^2c^4 + c^2p^2$. La propuesta es entonces

$$H = \alpha_0 mc^2 + \sum_{j=1}^3 \alpha_j c p_j \quad (8.6)$$

donde $p_j = -i\hbar\partial/\partial x_j$, a la cual vamos a exigir que

$$H^2 = (mc^2)^2 + \sum_{j=1}^3 (c p_j)^2$$

Los coeficientes α_μ evidentemente no pueden ser simples números, ya que igualando cuadrados obtenemos las condiciones

$$\alpha_\mu^2 = 1 \quad \mu = 0, 1, 2, 3 \quad (8.7)$$

$$\alpha_\mu \alpha_\nu + \alpha_\nu \alpha_\mu = 0 \quad \mu \neq \nu \quad (8.8)$$

Si definimos el *anticommutador* entre dos operadores A y B como

$$\{A, B\} \equiv AB + BA$$

podemos resumir las Ecs.(8.7) y (8.8) como

$$\{\alpha_\mu, \alpha_\nu\} = 2\delta_{\mu,\nu} \quad (8.9)$$

Así, los coeficientes α_μ tienen que ser operadores independientes y hermitianos (para que H sea hermitiano) que anticonmutan entre sí. Dichos operadores estarán representados por matrices de dimensión $n \times n$ y por lo tanto ψ no será un escalar, sino un vector de n dimensiones:

$$\psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}, t) \\ \vdots \\ \psi_n(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$$

al cual llamaremos *espinor*, por motivos que quedarán claros más adelante.

¿Cuanto vale n ? De las Ecs.(8.7) y (8.8) es fácil deducir que $\text{Tr } \alpha_\mu = 0$, mientras que de la Ec.(8.7) se deduce que los autovalores de los operadores α_μ solo pueden tomar los valores ± 1 . Ambas propiedades nos dicen que n tiene que ser par. Para $n = 2$ tenemos las matrices de Pauli, que satisfacen las relaciones de anticonmutación (8.9). No obstante, necesitamos cuatro matrices linealmente independientes y sabemos que las matrices de Pauli, junto con la identidad, conforman una base del espacio de matrices complejas con $n = 2$. Así, $n \geq 4$. Puede demostrarse que para $n = 4$ existen muchas representaciones posibles para estas matrices. Una de las representaciones más usadas es la llamada representación de Dirac, en la cual se eligen:

$$\alpha_0 = \begin{pmatrix} I_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -I_{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad \alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} \quad j = 1, 2, 3 \quad (8.10)$$

donde σ_j son las matrices de Pauli. Con esta elección, el operador

$$H = mc^2 \alpha_0 - i\hbar c \vec{\alpha} \cdot \nabla, \quad (8.11)$$

8.1. ECUACIÓN DE DIRAC

donde $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, ó

$$H = mc^2\alpha_0 + c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} \quad (8.12)$$

se conoce como *Hamiltoniano de Dirac* y la ecuación asociada $i\hbar\partial\psi/\partial t = H\psi$ como *ecuación de Dirac*. En presencia de un campo electromagnético tendremos que

$$H = mc^2\alpha_0 - e\phi(\vec{r})I_{4\times 4} + c\vec{\alpha}\cdot(\vec{p} + e\vec{A}) \quad (8.13)$$

donde

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

Vamos a demandar de la ecuación de Dirac que: a) mantenga la interpretación probabilística de la mecánica cuántica; b) que reproduzca la ecuación de Schrödinger en el límite no relativista y c) que sea invariante ante transformaciones de Lorentz.

8.1.2 Ecuación de continuidad

Sea

$$\psi^\dagger = \psi^{*T} = (\psi_1^*, \dots, \psi_4^*) \quad (8.14)$$

Si multiplicamos la ecuación de Dirac a izquierda por ψ^\dagger obtenemos

$$i\hbar\psi^\dagger\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i}\psi^\dagger(\vec{\alpha}\cdot\nabla\psi) + \psi^\dagger\left[mc^2\alpha_0 - e\phi(\vec{r})I_{4\times 4} + ce\vec{\alpha}\cdot\vec{A}\right]\psi \quad (8.15)$$

Si tomamos el conjugado hermitiano de la ecuación de Dirac y la multiplicamos por ψ a derecha obtenemos

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar c}{i}(\nabla\psi^\dagger\cdot\vec{\alpha})\psi + \psi^\dagger\left[mc^2\alpha_0 - e\phi(\vec{r})I_{4\times 4} + ce\vec{\alpha}\cdot\vec{A}\right]\psi \quad (8.16)$$

donde hemos usado que $\alpha_\mu^\dagger = \alpha_\mu$. Restando las Ecs.(8.15)-(8.16) obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger\psi) + c\nabla\cdot(\psi^\dagger\vec{\alpha}\psi) = 0 \quad (8.17)$$

ó

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + c \nabla \cdot \vec{J} = 0 \quad (8.18)$$

donde

$$\rho = \psi^\dagger \psi = \sum_{\sigma=1}^4 \psi_\sigma^* \psi_\sigma$$

$$J_k = c \psi^\dagger \alpha_k \psi \quad (k = 1, 2, 3)$$

Integrando la Ec.(8.18) en todo el espacio y usando el teorema de la divergencia, tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3x \psi^\dagger \psi = 0$$

Estas propiedades nos muestran que resulta consistente interpretar ρ como una densidad de probabilidad y \vec{J} como una corriente de probabilidad.

8.1.3 Límite no relativista

Al igual que en el caso de la ecuación de Schrödinger, las soluciones estacionarias de la ecuación de Dirac tienen la forma

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(\vec{r})$$

con

$$H\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

Para una partícula libre clásica, el límite no relativista se obtiene para $p \ll mc$, en cuyo caso

$$\sqrt{(mc^2)^2 + (cp)^2} \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m}$$

Para la ecuación de Dirac vamos a expresar los autovalores de la energía como

$$E = mc^2 + E'$$

El límite no relativista va a corresponder entonces a $E' \ll mc^2$. Definimos

$$\psi'(\vec{r}, t) = e^{-iE't/\hbar} \psi(\vec{r}) \quad (8.19)$$

8.1. ECUACIÓN DE DIRAC

de manera que

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-imc^2t/\hbar}\psi'(\vec{r}, t). \quad (8.20)$$

Tenemos

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = H'\psi' \quad (8.21)$$

donde

$$H' = H - mc^2 I_{4\times 4} \quad (8.22)$$

y

$$H'\psi(\vec{r}) = E'\psi(\vec{r}).$$

Consideremos ahora un electrón en un campo externo, esto es

$$H' = c\vec{\alpha}\cdot\vec{\pi} - e\phi I_{4\times 4} + mc^2(\alpha_0 - I_{4\times 4}) \quad (8.23)$$

donde $\vec{\pi} \equiv \vec{p} + e\vec{A}$ y

$$\alpha_0 - I_{4\times 4} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -2I_{2\times 2} \end{pmatrix}$$

Vamos a expresar

$$\psi' = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$

es decir

$$\varphi = \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{pmatrix} \quad \chi = \begin{pmatrix} \psi'_3 \\ \psi'_4 \end{pmatrix}$$

Utilizando la representación (8.10) la ecuación de Dirac nos queda

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi} \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix} - e\phi \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} - 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \quad (8.24)$$

esto es,

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = c\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\chi - e\phi\varphi \quad (8.25)$$

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = c\vec{\sigma}\cdot\vec{\pi}\varphi - e\phi\chi - 2mc^2\chi \quad (8.26)$$

Tomando en cuenta que

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = E' \chi$$

de la Ec.(8.26) que

$$\chi(2mc^2 + E' + e\phi) = c \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \varphi,$$

y en el límite no relativista

$$\chi \approx \frac{1}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{\pi} \varphi. \quad (8.27)$$

Reemplazando esta última en la Ec.(8.25) tenemos

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) - e\phi \right] \varphi \quad (8.28)$$

Usando la identidad

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}), \quad (8.29)$$

donde \vec{a} y \vec{b} son vectores arbitrarios, tenemos que

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi}) &= \vec{\pi}^2 + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{\pi} \times \vec{\pi}) \\ &= \vec{\pi}^2 + e\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \end{aligned} \quad (8.30)$$

y reemplazando en la Ec.(8.28) obtenemos finalmente

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 + \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} - e\phi \right] \varphi \quad (8.31)$$

La Ec.(8.31) es precisamente la ecuación de Pauli. A diferencia de la teoría de Pauli, donde estas cantidades se incluyen ad hoc, el spin aparece naturalmente en la teoría relativista, incluyendo el valor correcto del momento magnético electrónico

$$\vec{\mu} = -\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma},$$

correspondiente a una razón giromagnética $g = 2$.

8.1.4 Covariancia, rotaciones y spin

La relatividad especial nos exige que, dados dos observadores O y O' ubicados en diferentes referenciales inerciales describan el mismo evento físico con coordenadas espacio-temporales x y x' respectivamente. Ambas coordenadas están relacionadas a través de una transformación de Lorentz $x' = ax$, o bien

$$x'^{\nu} = a^{\nu}_{\mu} x^{\mu}; \quad (8.32)$$

a es lineal y homogénea, y los coeficientes a^{ν}_{μ} dependen solo de las velocidades y orientaciones relativas de ambos referenciales, de tal manera que mantienen invariante el elemento de línea

$$ds^2 = \eta_{\mu\nu} dx^{\mu} dx^{\nu}$$

donde

$$\eta_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (8.33)$$

es el tensor métrico y $(x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, x, y, z)$. La invariancia del elemento de línea implica la relación

$$\eta_{\alpha\beta} a^{\alpha}_{\mu} a^{\beta}_{\nu} = \eta_{\mu\nu} \quad (8.34)$$

Consideremos ahora la Ec. de Dirac para una partícula libre correspondiente al Hamiltoniano (8.11). Multiplicando la misma por α_0/c y usando que $\alpha_0^2 = 1$ obtenemos

$$i\hbar \left(\gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} + \gamma^1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \gamma^2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \gamma^3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) \psi - mc\psi = 0 \quad (8.35)$$

donde hemos definido

$$\gamma^0 \equiv \alpha_0 \quad \gamma^{\nu} \equiv \alpha_0 \alpha_{\nu} \quad \nu = 1, 2, 3 \quad (8.36)$$

que se conocen como *matrices de Dirac*.

De las relaciones de anticonmutación (8.9) se deduce que las matrices de Dirac satisfacen las relaciones de anticonmutación

$$\{\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}\} = 2\eta^{\mu\nu} I_{4 \times 4} \quad (8.37)$$

De su definición es claro que las matrices γ^ν con $\nu = 1, 2, 3$ son antihermitianas con $(\gamma^\nu)^2 = -1$ y γ^0 obviamente es hermitiana. En la representación (8.10) estas toman la forma

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -I_{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ -\sigma_j & 0 \end{pmatrix} \quad j = 1, 2, 3 \quad (8.38)$$

La ecuación de Dirac para una partícula libre puede ser entonces escrita de manera compacta como

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right) \psi = 0 \quad (8.39)$$

A fin de corroborar la covariancia de la ecuación de Dirac, debemos comprobar dos requisitos. Primero, debe haber una prescripción explícita que, dada la "función de onda" $\psi(x)$ medida por el observador O , permita calcular la función de onda $\psi'(x')$ que describe para O' el mismo estado físico. En otras palabras, necesitamos saber como se transforman los objetos ψ . Segundo, $\psi'(x')$ tiene que ser solución de una ecuación que adopta la forma (8.39) en el sistema primado, esto es

$$\left(i\hbar\gamma'^\mu \frac{\partial}{\partial x'^\mu} - mc \right) \psi'(x') = 0 \quad (8.40)$$

donde las matrices γ'^μ tienen que ser también matrices de Dirac.

Vamos a asumir que la relación entre $\psi'(x')$ y $\psi(x)$ es lineal, ya que tanto la ecuación de Dirac como las transformaciones de Lorentz lo son, esto es $\psi'(x') = S(a)\psi(x)$. Mas aún, vamos a asumir que S tiene inversa tal que $S^{-1}(a) = S(a^{-1})$. Así, podemos escribir la Ec.(8.39) como

$$\left(i\hbar S(a)\gamma^\mu S^{-1}(a) \frac{\partial}{\partial x^\mu} - mc \right) \psi'(x') = 0. \quad (8.41)$$

De (8.32) tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\partial x'^\nu}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu} = a_\mu^\nu \frac{\partial}{\partial x'^\nu}$$

y así

$$\left(i\hbar S(a)\gamma^\mu S^{-1}(a) a_\mu^\nu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} - mc \right) \psi'(x') = 0. \quad (8.42)$$

La ecuación (8.42) es igual a la (8.40) siempre que exista una transformación S tal que

8.1. ECUACIÓN DE DIRAC

$$S(a)\gamma^\mu S^{-1}(a)a_\mu^\nu = \gamma^\nu \quad (8.43)$$

o bien usando la Ec.(8.34)

$$S(a)\gamma^\mu S^{-1}(a) = a_\nu^\mu \gamma^\nu. \quad (8.44)$$

Teorema de Pauli: Dados dos conjuntos de matrices de Dirac $\{\gamma^\mu\}$ y $\{\hat{\gamma}^\mu\}$ existe una matriz no singular S que las conecta: $S\gamma^\mu S^{-1} = \hat{\gamma}^\mu$.

Por otra parte, resulta evidente que $a_\nu^\mu \gamma^\nu$ son también matrices de Dirac (satisfacen las relaciones de conmutación), con lo cual queda demostrada la covariancia de la ecuación de Dirac, en tanto la función de onda se transforme como $\psi'(x') = S\psi(x)$, donde S viene dada por la Ec.(8.44). La manera de determinar S es considerar transformaciones de Lorentz infinitesimales

$$x'^\mu = x^\mu + \epsilon \lambda^\mu_\nu x^\nu$$

esto es,

$$a^\mu_\nu = \delta^\mu_\nu + \epsilon \lambda^\mu_\nu.$$

De la Ec.(8.34) se deduce que los coeficientes $\lambda_{\mu,\nu}$ son antisimétricos: $\lambda_{\nu\mu} = -\lambda_{\mu\nu}$. Si asumimos

$$S = I_{4 \times 4} + \epsilon T,$$

reemplazando en la Ec.(8.44) y desarrollando a $\mathcal{O}(\epsilon)$ obtenemos la ecuación para el operador T :

$$\gamma^\mu T - T\gamma^\mu = \lambda^\mu_\nu \gamma^\nu \quad (8.45)$$

Utilizando las relaciones de conmutación (8.37) y la antisimetría de los coeficientes $\lambda_{\nu\mu}$ se demuestra que una solución de la Ec.(8.45) es

$$T = \frac{1}{8} \lambda^{\mu\nu} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \quad (8.46)$$

Tomemos por ejemplo las rotaciones en \mathbb{R}^3 . Supongamos por simplicidad una rotación un ángulo θ alrededor del eje z :

$$a = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Para un ángulo infinitesimal ϵ tenemos entonces que

$$\lambda^{12} = -\lambda^{21} = -1$$

y todos los demás coeficientes se anulan. Usando además que $\gamma_1\gamma_2 = -\gamma_2\gamma_1$ tenemos que

$$T = -\frac{1}{2}\gamma_1\gamma_2 = -\frac{1}{2}\gamma^1\gamma^2 = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_1 \\ -\sigma_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ -\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$$

De esta manera,

$$S = I + \frac{i\epsilon}{2}\Sigma_3$$

donde

$$\Sigma_3 \equiv \begin{pmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$$

es el generador de rotaciones infinitesimales alrededor del eje z. Para una rotación un ángulo finito θ tendremos

$$S = e^{i\theta\Sigma_3/2}$$

El mismo resultado se obtiene para rotaciones alrededor de los otros dos ejes, de manera que

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad (8.47)$$

es el generador de rotaciones infinitesimales alrededor de un eje arbitrario. El operador $\vec{\Sigma}$ tiene autovalores ± 1 . Vemos así que los estados ψ resultan ser efectivamente espinores de 4 dimensiones, esto es, objetos que resultan invariantes ante una rotación en un ángulo 4π , pero cambian de signo ante una rotación un ángulo de 2π .

Por otra parte, si analizamos el conmutador del operador momento angular $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ con el Hamiltoniano de Dirac para una partícula libre

$$H = mc^2\alpha_0 + c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}$$

es fácil ver que

$$[\vec{L}, H] = i\hbar c \vec{\alpha} \times \vec{p},$$

8.1. ECUACIÓN DE DIRAC

lo cual nos dice que, a menos que la partícula está en reposo $p = 0$, el momento angular orbital no se conserva. Sin embargo, el Hamiltoniano es invariante ante rotaciones (partícula libre). Esto nos dice nos esta faltando considerar otro momento angular. Es facil ver que

$$\frac{\hbar}{2} [\vec{\Sigma}, H] = -i\hbar c \vec{\alpha} \times \vec{p},$$

de tal manera que

$$[\vec{J}, H] = 0$$

donde

$$\vec{J} = \vec{L} + \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \quad (8.48)$$

es el momento angular total y $\vec{S} = \hbar\vec{\Sigma}/2$ se identifica con el operador de spin, esto es, el momento angular en un referencial en el cual la partícula esta en reposo. Notemos que, a diferencia del caso no relativista, para una partícula relativista los momentos angulares orbital y de spin no se conservan por separado, a menos que la partícula esté en reposo. Esto significa que los autoestados del Hamiltoniano no serán en general autoestados del spin. Sin embargo, puede obtenerse un buen número cuántico si consideramos la proyección del spin en la dirección de movimiento. Definimos el operador dirección de movimiento como

$$\vec{n} = \frac{\vec{p}}{p}$$

y la *helicidad* Λ como

$$\Lambda = \vec{S} \cdot \vec{n}.$$

Notando que

$$\Lambda = \frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} \cdot \vec{n} = \left(\frac{\hbar}{2} \vec{\Sigma} + \vec{r} \times \vec{p} \right) \cdot \frac{\vec{p}}{p} = \vec{J} \cdot \vec{n}$$

y por lo tanto

$$[H, \Lambda] = 0.$$

La helicidad se conserva y los autoestados del Hamiltoniano pueden ser a la vez autoestados de Λ .

8.1.5 Soluciones de partícula libre

Vamos a considerar soluciones de la forma

$$\psi = w\varphi(\vec{r})$$

donde w es un vector columna de 4 componentes independientes de \vec{r} y vamos a considerar ondas planas $\varphi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Tomemos el caso de una onda en la dirección z : $\vec{k} = k\vec{e}_z$. Tenemos que $\vec{p}\varphi(\vec{r}) = \hbar k\varphi(\vec{r})\vec{e}_z$ y la ecuación de autovalores $H\psi = E\psi$ toma la forma

$$\begin{pmatrix} mc^2 & 0 & \hbar kc & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & -\hbar kc \\ \hbar kc & 0 & -mc^2 & 0 \\ 0 & -\hbar kc & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} w(k) = Ew(k) \quad (8.49)$$

Resulta evidente que los autovectores de esta ecuación tendrán la estructura

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ 0 \\ u_2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad v = \begin{pmatrix} 0 \\ v_1 \\ 0 \\ v_2 \end{pmatrix};$$

reemplazando en la Ec.(8.49) obtenemos

$$\begin{pmatrix} mc^2 & \hbar kc \\ \hbar kc & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad (8.50)$$

$$\begin{pmatrix} mc^2 & -\hbar kc \\ -\hbar kc & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \quad (8.51)$$

Ambas ecuaciones tienen los mismos autovalores:

$$E = \pm\sqrt{(mc^2)^2 + (\hbar ck)^2}$$

de tal manera que $E^2 = m^2c^4 + c^2p^2$ ($p = \hbar k$), tal como era de esperar. Los autovectores correspondientes al autovalor de energía positiva son

$$w_1 = \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 + (\hbar kc)^2}} \begin{pmatrix} \hbar kc \\ 0 \\ \epsilon \\ 0 \end{pmatrix} \quad w_2 = \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 + (\hbar kc)^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \hbar kc \\ 0 \\ -\epsilon \end{pmatrix}$$

y los autovectores correspondientes al autovalor de energía negativa son

8.1. ECUACIÓN DE DIRAC

$$w_3 = \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 + (\hbar kc)^2}} \begin{pmatrix} -\epsilon \\ 0 \\ \hbar kc \\ 0 \end{pmatrix} \quad w_4 = \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 + (\hbar kc)^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \epsilon \\ 0 \\ \hbar kc \end{pmatrix}$$

donde $\epsilon = |E| - mc^2$. Claramente estos son todos autoestados de $\Lambda(\hbar\Sigma^3/2$ en este caso), donde w_1 y w_3 tienen helicidad positiva (autovalor $\lambda = \hbar/2$) y w_2 y w_4 tienen helicidad negativa (autovalor $\lambda = -\hbar/2$).

La existencia de un espectro no acotado de energías negativas constituye un problema serio para la teoría de Dirac. En particular, esto implica la inestabilidad de cualquier átomo, ya que ante la interacción con el campo de radiación, un electrón tendría a su disposición un número infinito de estados con menor energía a los cuales transigir. Para solucionar este problema, Dirac propuso en 1930 una reinterpretación de la teoría que se conoce como "teoría de huecos". En analogía a lo que ocurre en semiconductores, el espectro de partícula libre presenta un gap de ancho $2mc^2$, entre las "bandas" infinitas de estados con energías positivas y negativas. Dirac propuso entonces que la banda de energías negativas se encontraría totalmente ocupada, constituyendo lo que se conoce como "mar de Dirac", en analogía al "mar de Fermi". De esta manera, por el principio de exclusión de Pauli, los electrones con energías positivas no podrían transigir a los estados de energía negativa. No obstante, esta interpretación implica la existencia de un nuevo fenómeno. Debido a la interacción con el campo de radiación, un electrón en el mar de Dirac puede ser excitado a un estado de energía positiva $+E' > mc^2$. Pero esto involucra la creación de un "hueco" en el mar de Dirac, lo cual equivale a la creación de una partícula de carga positiva e y con energía $+E$. De esta manera, deberíamos poder observar la transformación de un fotón en un par de partículas de carga opuesta y también el proceso opuesto: un par de partículas de carga opuesta que se aniquilan con la consiguiente aparición de un fotón. Esta partícula de carga positiva, el *positrón*, fue observada en 1932 por Carl Anderson. Si aceptamos que la ecuación de Dirac describe el comportamiento de cualquier fermión, para cada partícula existirá una antipartícula. Esta fue la primera evidencia de la existencia de antimateria.

Bibliografía Recomendada

- *Relativistic Quantum Mechanics*, J. D. Bjorken and S. D. Drell, McGraw-Hill (1964).

- *Quantum Field Theory*, F. Mandl and G. Shaw, John Wiley and Sons (1986).
- *An introduction to the Standard Model of Particle Physics*, W. N. Cottingham and D. A. Greenwood, Cambridge University Press (1998).

d

8.1. ECUACIÓN DE DIRAC

Parte VI

Laser

CAPÍTULO 9

LASER

9.1 Introducción

El material de este capítulo está pensado para introducir las ideas básicas que subyacen en el fenómeno de LASER (*light amplification by stimulated emission of radiation*). Éstas son, principalmente, las nociones de transiciones *estimuladas* y *espontáneas* que tienen lugar entre los niveles de energía de los electrones en su interacción con la radiación electromagnética, y el concepto de *estado estacionario* que el sistema atómico alcanza debido al balance entre absorción y emisión de energía en presencia de radiación y un ambiente. Utilizando estos fundamentos, se describirán los procesos físicos que ocurren en la generación de la radiación laser.

Para un gran número de aplicaciones es suficiente dar a la radiación estimulada un tratamiento semiclásico, considerando la interacción de un átomo cuántico con un campo de radiación electromagnética clásico. En efecto, este tipo de enfoque y el cálculo puramente cuántico de un sistema átomo-fotones arroja probabilidades de transición similares en el cálculo perturbativo, cuando el número n de fotones es grande (tal que $\sqrt{(n+1)} \simeq \sqrt{(n)}$).

Contrariamente, la tasa de emisión espontánea no puede calcularse con un enfoque semiclásico. Sin embargo, ésta puede ser determinada mediante una estrategia debida a Einstein, quien propuso que el equilibrio térmico de la materia con la radiación podría establecerse mediante ambos tipos de transiciones, estimuladas y espontáneas.

Desde el punto de vista de la mecánica cuántica moderna, las fluctuaciones de vacío del campo electromagnético representan el mecanismo que da lugar

9.1. INTRODUCCIÓN

a las transiciones espontáneas, que necesariamente deben estar presentes para asegurar el equilibrio térmico. Es interesante aquí resaltar la importancia de alcanzar alguna intuición sobre estos procesos, que a pesar de ser sutiles, se manifiestan en diversidad de fenómenos que van desde la luz a la que accedemos en las lámparas de uso habitual, hasta los mecanismos microscópicos involucrados en experimentos de óptica cuántica y los dispositivos cuánticos.

Otro aspecto básico importante al momento de tratar el problema del laser, es la descripción de la evolución irreversible del sistema observado en la escala de tiempo de las observaciones (escala macroscópica) y la relación de esta dinámica con los aspectos microscópicos asociados con las transiciones electrónicas. Este tema no será tratado en toda su extensión, sino que se describirá el origen de las ecuaciones de balance y el significado de sus coeficientes en términos de probabilidades de transición.

Estas ideas se utilizarán para describir el laser, como un fenómeno de amplificación de la luz en un proceso colectivo en cascada, basado en el cumplimiento de tres condiciones principales:

- En el material del laser debe haber un par de niveles de energía que puedan proveer transiciones cercanas a la frecuencia que se desea obtener.
- Debe ser posible crear una inversión de poblaciones en estado estacionario, en el que el nivel más alto quede más poblado que el más bajo, para que la emisión estimulada ocurra más frecuentemente que la absorción (bombeo).
- Se debe favorecer que se produzcan muchos procesos de emisión estimulada para incrementar la intensidad de la radiación. Para eso debe diseñarse una cavidad resonante.

Este diseño permite amplificar el campo, favoreciendo que se produzcan muchas transiciones estimuladas en un proceso en cadena, resonante, donde cada átomo es 'forzado' por la radiación incidente proveniente de otros átomos, todos emitiendo con la misma fase y dirección. Así se puede lograr intensidades de radiación elevadas. También se puede seleccionar muy finamente los modos de oscilación a lo largo de un eje, descartando los asociados con otras direcciones. Este procedimiento también permite obtener radiación con un ancho de banda característico de la cavidad, que puede ser drásticamente menor que el del ancho 'natural' debido a la interacción de los átomos con otros grados de libertad externos (ensanchamientos homogéneo e inhomogéneo).

9.2 Transiciones electrónicas estimuladas y espontáneas. Coeficientes de Einstein

En primer lugar estudiaremos los dos tipos de procesos microscópicos básicos mediante los cuales la radiación interactúa con un sistema de átomos. Nos interesa describir los procesos de *absorción* y *emisión*, y obtener la relación que existe entre ellos. Estos conceptos son de carácter básico, y son de vital importancia en la descripción de la amplificación de luz coherente que se produce en la generación de luz laser. La descripción que daremos del fenómeno será mayoritariamente semi-clásica, es decir que consideraremos la interacción del campo eléctrico clásico con el momento dipolar eléctrico del átomo. Sin embargo, discutiremos las limitaciones de este enfoque para explicar la totalidad de los procesos intervinientes, señalando la necesidad de un tratamiento cuántico completo de algunos de los aspectos importantes.

Comencemos analizando las transiciones que un electrón atómico puede realizar cuando el átomo interactúa con la radiación electromagnética, en un enfoque perturbativo semiclásico. Esto es, consideramos un átomo cuántico en presencia de un campo clásico, representado por un Hamiltoniano con la forma general

$$H = H_0 + V(t) , \quad (9.1)$$

donde H_0 es el Hamiltoniano del átomo aislado y $V(t)$ representa la perturbación originada en el acople del átomo con el campo electromagnético externo. En particular, consideremos la interacción del momento dipolar eléctrico atómico con el campo eléctrico externo (aproximación dipolar). Asumiremos que el campo es una onda plana, y que las longitudes de onda involucradas son mucho más grandes que las dimensiones atómicas, por lo que la perturbación tendrá la forma

$$V(t) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(t) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_0 \cos \omega t , \quad (9.2)$$

donde \mathbf{d} es el operador que representa el momento dipolar del átomo. Suponemos que la perturbación “se enciende” en $t = 0$, y usamos la teoría de perturbaciones de primer orden para estimar el comportamiento del átomo para $t > 0$. Esto es, dados dos estados atómicos estacionarios con energías E_n y E_m , la amplitud de probabilidad de transición al estado n -ésimo a tiempo t , si en $t = 0$ el sistema estaba en el estado m -ésimo es

$$a_{nm}(t) = \frac{1}{2} \langle n | \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_0 | m \rangle \left[\frac{1 - e^{\frac{it}{\hbar}(E_n - E_m - \hbar\omega)}}{(E_n - E_m - \hbar\omega)} - \frac{1 - e^{\frac{-it}{\hbar}(E_m - E_n - \hbar\omega)}}{(E_m - E_n - \hbar\omega)} \right] . \quad (9.3)$$

9.2. TRANSICIONES ELECTRÓNICAS ESTIMULADAS Y ESPONTÁNEAS. COEFICIENTES DE EINSTEIN

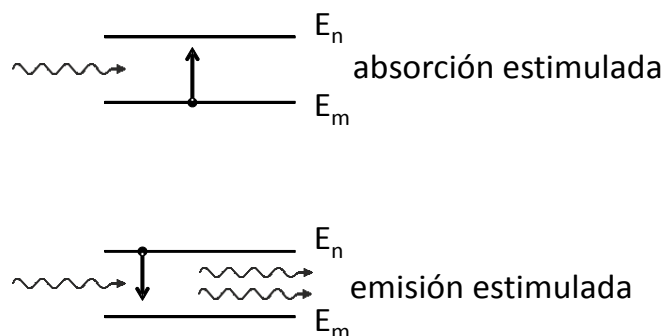


FIGURE 9.1: Absorción y emisión estimuladas.

Interpretemos este resultado en términos de los procesos elementales involucrados. Supongamos $E_m < E_n$, entonces cuando $E_n - E_m \simeq \hbar\omega$, el primer término crece mucho mientras que el segundo permanece mucho más pequeño. Entonces existe una probabilidad grande, dada por el módulo cuadrático del primer término, de una transición hacia un nivel de energía más alto, involucrando absorción de energía. En términos de fotones, el sistema absorbe un fotón del campo electromagnético y realiza una *absorción estimulada*. Análogamente, si $E_n < E_m$, entonces cuando $E_m - E_n \simeq \hbar\omega$ el segundo término es mucho más grande que el primero, representando una transición hacia un estado con energía más baja. Este proceso corresponde a una *emisión estimulada*. La Figura 9.1 ilustra estos procesos elementales.

Cuando en el cálculo de la amplitud de probabilidad de transición entre dos niveles de energías E_n y E_m consideramos que el átomo está acoplado *cuánticamente* con un modo de frecuencia ω del campo electromagnético, encontramos que la amplitud de probabilidad es proporcional a la siguiente expresión, según la teoría de perturbaciones de primer orden ¹:

$$a_{nm}(t) \propto \left[n^{1/2} \frac{1 - e^{i(E_n - E_m - \hbar\omega)t/\hbar}}{E_n - E_m - \hbar\omega} - (n + 1)^{1/2} \frac{1 - e^{i(E_m - E_n - \hbar\omega)t/\hbar}}{E_m - E_n - \hbar\omega} \right]. \quad (9.4)$$

¹Consultar por ejemplo C. Gerry and P. Knight, *Introductory Quantum Optics*, Cambridge University Press (2005).

Para obtener (9.4), se considera que el sistema no perturbado es el sistema formado por el átomo y el campo de radiación. Este sistema es perturbado por el Hamiltoniano de acople de la forma de la Ecuación (7.71).

El resultado (9.4) también puede ser analizado para los casos $E_n > E_m$ y $E_m > E_n$ en la misma línea que el resultado semiclásico anterior, y verificamos que predice, además de emisión y absorción estimuladas como en el caso anterior, la existencia de emisión espontánea, asociada con el segundo término cuando $n = 0$. Es decir, existe una probabilidad de que el electrón realice una transición radiativa hacia niveles de energía menores, aún en situaciones en las que el campo electromagnético circundante no posea ningún fotón ($n = 0$). En el estado de vacío del campo existen aún fluctuaciones del campo eléctrico y de la energía del punto cero que representan un mecanismo de perturbación cuántico capaz de provocar las transiciones espontáneas. En la Figura (9.2) se esquematiza este proceso, en el que el electrón decae 'espontáneamente' emitiendo un fotón hacia el campo.

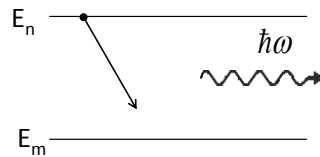


FIGURE 9.2: . Emisión espontánea. El electrón atómico decae emitiendo un fotón espontáneamente.

Las transiciones estimuladas son de vital importancia para la implementación de un laser, como veremos más adelante. En este caso, el campo electromagnético "gana" la energía $\hbar\omega$ del átomo. Podemos decir que entra un fotón y salen dos. Esto permite la posibilidad de amplificación de luz coherente. Veremos que si somos capaces de crear una situación estacionaria en la que la población del estado de mayor energía supere a la población del estado de menor energía, entonces puede producirse una cascada de transiciones abruptamente, ya que en cada transición el campo gana un fotón con las mismas características (frecuencia, fase y dirección de propagación).

El tratamiento realizado hasta aquí ha servido para identificar mecanismos microscópicos que subyacen en la interacción cuántica de un átomo con un campo electromagnético. Las amplitudes de probabilidad obtenidas son

9.3. ECUACIÓN DE BALANCE (ECUACIÓN MAESTRA)

dependientes del tiempo y no son consistentes con estados estacionarios o de equilibrio. El resultado proviene de haber considerado el sistema cuántico cerrado (libre de influencias ambientales). Resta entonces tener en cuenta en el análisis los procesos disipativos originados en la interacción del átomo con un ambiente, además de la radiación externa. Esta interacción es responsable de la existencia de un tiempo de vida finito de los estados atómicos, y su inclusión permitirá explicar la absorción y emisión de energía por parte de los átomos. En estas notas consideraremos las fluctuaciones del vacío como los efectos ambientales, que dan lugar al “ensanchamiento natural” de los niveles de energía atómicos.

9.3 Ecuación de balance (ecuación maestra)

Un aspecto importante sobre el que se basa la descripción del laser es el de los procesos irreversibles mediante los cuales un sistema puede absorber energía del campo y emitir energía hacia el mismo en una situación global estacionaria. El análisis de este aspecto de la física involucra la discusión de la relación existente entre la descripción de la dinámica microscópica regida por ecuaciones reversibles temporalmente, y las leyes macroscópicas que son de carácter irreversible. La teoría de sistemas cuánticos abiertos se propone desarrollar un marco general para analizar la dinámica de sistemas que no evolucionan unitariamente como consecuencia de su acople con un ambiente no controlado, con el que puede intercambiar energía y coherencia. En este marco, para una gran cantidad de fenómenos físicos, entre los que se cuenta la interacción de la luz con sistemas atómicos, es posible describir la dinámica observada por medio de una ecuación diferencial para el operador matriz densidad del sistema observado ρ_S , derivada en el contexto de los procesos Markovianos. Las suposiciones centrales contenidas en la derivación de esta ecuación son la de acople sistema-ambiente débil y ambiente disipativo .

Consideremos un átomo interactuando con un sistema no observado R . El Hamiltoniano del sistema completo es

$$H = H_S + H_R + H_{SR} \quad (9.5)$$

donde H_S y H_R son los Hamiltonianos del sistema atómico y del ambiente o reservorio, respectivamente, mientras que H_{SR} representa la interacción entre ambos subsistemas ². Partiendo de la ecuación (4.25), y aplicando la condición

²La interacción puede tener la forma general $V = \sum_i Q_i \otimes F_i$, siendo Q_i y F_i operadores tensoriales que operan en los espacios de Hilbert del átomo y R respectivamente.

de markovianidad, es posible derivar la ecuación maestra cuántica markoviana para el operador densidad reducido del sistema atómico³

$$\frac{\partial \rho_S(t)}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dt' \text{Tr}_R [H_{SR}(t)_I, [H_{SR}(t')_I, \rho_S(t) \otimes \rho_R]] . \quad (9.6)$$

La aproximación que lleva a la ecuación maestra (9.6) es esencialmente la de acople débil y correlación cuántica débil entre el sistema de interés (en este caso el átomo) y el reservorio. Esta condición implica que los tiempos de evolución del sistema hacia el equilibrio son muy largos en comparación a los tiempos internos de pérdida de correlación del baño (esto equivale a considerar que el baño térmico disipa la información que proviene del sistema en una escala de tiempo τ que es muy corta en comparación con la escala en que se puede observar al sistema atómico). Como consecuencia de dichas suposiciones sobre la naturaleza de los sistemas y de la interacción entre ellos, la ecuación maestra describe la evolución de $\rho_S(t)$ en una escala de tiempo caracterizada por intervalos Δt tales que $\tau \ll \Delta t \ll T_1$, donde T_1 simboliza un tiempo característico de la evolución del sistema observado⁴.

Cuando la ecuación (9.6) se proyecta en la base de H_S , se obtienen las *ecuaciones de balance* o ecuaciones de Pauli (ver K. Blum, 2012) para las probabilidades p_m **de encontrar al electrón del átomo en los diferentes estados accesibles**

$$\frac{dp_m}{dt} = \sum_{n \neq m} W_{nm} p_n - p_m \sum_{n \neq m} W_{mn} , \quad (9.7)$$

donde W_{nm} es la probabilidad de transición por unidad de tiempo, desde el estado de energía E_n al estado con energía E_m . Estas tasas de transición son *independientes del tiempo* y corresponden al límite perturbativo (regla de oro de Fermi). Este sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas, con coeficientes constantes representa la evolución temporal irreversible de la probabilidad de encontrar al átomo en los diferentes estados de energía.

³Ver por ejemplo H. Breuer and F. Petruccione, *The theory of open quantum systems*, Oxford (2002)

⁴Físicamente, son las *fluctuaciones* del Hamiltoniano H_{SR} , caracterizadas por un *tiempo de correlación*, las que definen la tasa con que el sistema observado disipa hacia el ambiente. Ver por ejemplo A. Abragam, *The Principles of Nuclear Magnetism*, Clarendon Press, Oxford (1961) (capítulo 8). La suposición de la existencia de la escala de tiempo intermedia Δt se conoce en la literatura como hipótesis de *coarse grain*. Cuando, con criterios similares a los usados en la teoría de perturbaciones, se eliminan los términos ‘no-seculares’ rápidamente oscilatorios, la ecuación (9.6) adopta la forma general que debe tener toda ecuación que describa una evolución no-unitaria markoviana, es decir la forma de un generador de un semigrupo dinámico cuántico (conocido como generador de Lindblad).

9.3. ECUACIÓN DE BALANCE (ECUACIÓN MAESTRA)

Aplicaremos esta descripción a un conjunto de átomos en una cavidad radiante. Allí, el reservorio es la radiación de equilibrio y la interacción proviene del acople del momento dipolar eléctrico de los átomos con el campo eléctrico de la radiación.

Las transiciones generadas por el acoplamiento del átomo con el reservorio del campo electromagnético del vacío producen transiciones de emisión pero no de absorción espontáneas. Para el modelo de átomos de dos niveles que consideraremos más adelante, la ecuación maestra que representa la dinámica del electrón en presencia del ambiente tiene un solo término. Luego, se sumará como proceso independiente la acción de la radiación.

Sabemos de la teoría cuántica que las tasas de transición calculadas a partir de la teoría de perturbaciones son válidas en una escala de tiempo muy corta, esencialmente lo suficientemente corta como para que la condición inicial no haya cambiado apreciablemente. Por otro lado, la ecuación (9.7) representa la evolución en la escala de tiempo macroscópica, es decir la escala de la observación. Así, interpretamos que la ecuación maestra markoviana implica la posibilidad de ‘extender’ la descripción de la dinámica a la escala macroscópica, más allá de los límites de la teoría de perturbaciones. La validez de esta descripción depende de la justeza de la hipótesis sobre la naturaleza de la interacción entre el sistema y su entorno, que lleva a la condición markoviana. En estas condiciones, la dependencia temporal de la matriz densidad y de los valores de expectación calculados a partir de ella, se describen en una escala ‘gruesa’ (coarse-graining). La evolución de los observables queda caracterizada por parámetros de ‘relajación’ cuyos valores están dictados por los procesos microscópicos a través de las tasas de transición W_{nm} .

Hasta aquí, hemos considerado la interacción del átomo con un ambiente cuántico en equilibrio térmico. Nos interesa ahora estudiar la dinámica del sistema atómico cuando además está sujeto a la acción de un campo electromagnético externo, con un Hamiltoniano $V(t) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_0 \cos \omega t$ de la forma (9.2). El razonamiento para incluir la radiación se describe en forma resumida en la Sección (9.5) (Apéndice). La estrategia consiste básicamente en:

- Extender la definición del Hamiltoniano del sistema incluyendo en él el Hamiltoniano atómico y la interacción: $H_S = H_{at} + V(t)$.
- Utilizar el hecho que en ausencia de procesos de relajación, la dinámica de la matriz densidad reducida responde a la ecuación de Liouville-Von Neumann. Entonces se asume que la acción de la radiación externa entra en la descripción en la forma de la ecuación de Liouville-Von Neumann, es decir la radiación externa no modifica los procesos disipativos originados en el acoplamiento átomo-ambiente.

- Incorporar la acción de la relajación de manera similar que en la derivación de la Ec.(9.7).

De esta forma se considera la interacción del átomo con la radiación electromagnética en presencia de los procesos de relajación debidos al acople con el ambiente y es posible describir la potencia de la radiación absorbida o emitida por parte de los átomos interactuando con el campo electromagnético ⁵. En estas condiciones, la ecuación maestra contiene las contribuciones de los dos procesos, asumidos independientes: emisión espontánea y absorción y emisión estimuladas. Por simplicidad, asumiremos que el espectro de energías del átomo tiene solamente dos niveles,

$$\begin{aligned}\frac{dp_1}{dt} &= [W_{21}^{Sp} + W(\omega)_{21}] p_2 - W(\omega)_{12} p_1 \\ \frac{dp_2}{dt} &= -[W_{21}^{Sp} + W(\omega)_{21}] p_2 + W(\omega)_{12} p_1,\end{aligned}\tag{9.8}$$

donde W_{21}^{Sp} es la tasa de las emisiones espontáneas, mientras que $W(\omega)_{12}$ y $W(\omega)_{21}$ representan respectivamente las probabilidades de transición por unidad de tiempo de absorción y emisión estimuladas, debidas a la radiación aplicada de frecuencia ω

$$W(\omega)_{12} = W(\omega)_{21} = \frac{|\mathbf{d}_{12} \cdot \mathbf{E}_0|^2}{2\hbar^2} \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2},\tag{9.9}$$

donde $\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ y $\mathbf{d}_{12} \equiv \langle 1|\mathbf{d}|2 \rangle$ es el elemento de matriz del momento dipolar y γ es el ancho de la Lorentziana que depende de los mismos procesos fluctuacionales que dan lugar a W_{21}^{Sp} , es decir las fluctuaciones de vacío en nuestro caso.

En la ecuación (9.9), aparecen los dos procesos que controlan la dinámica del átomo: la emisión espontánea que define una tendencia a despoblar el nivel superior, y la emisión y absorción estimuladas, con igual tasa de transición. La presencia de la emisión espontánea asegura que el sistema podrá llegar a una situación estacionaria con ‘poblaciones’ o números de ocupación distintos. En

⁵Para un tratamiento de la ecuación maestra markoviana a partir de la dinámica de la matriz densidad reducida del sistema atómico, ver por ejemplo el capítulo 8 del texto de K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications*, 3^{era} edición. Más específicamente, es posible deducir una ‘ecuación maestra de la óptica cuántica’ para la matriz densidad reducida, que contiene naturalmente en su expresión los operadores que representan las transiciones estimuladas y espontáneas. Para ello se considera la interacción del átomo con la radiación cuantizada (ver por ejemplo, H.P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press (2002), Capítulo 3, W. Louisell, *Quantum Statistical Properties of Radiation*, J. Wiley, New York (1990) .

9.3. ECUACIÓN DE BALANCE (ECUACIÓN MAESTRA)

el caso de la radiación térmica de una cavidad a temperatura T , la emisión espontánea asegura la llegada al equilibrio térmico.

Expresando el campo eléctrico medio en función de la energía electromagnética promedio, $u(\omega) = \frac{\epsilon_0}{2} E_0(\omega)^2$, y promediando sobre todas las direcciones de polarización y todas las direcciones de incidencia del campo eléctrico, la ecuación anterior resulta ⁶

$$W(\omega)_{12} = W(\omega)_{21} = \frac{\pi d^2}{3\epsilon_0 \hbar^2} u(\omega) f(\omega) , \quad (9.10)$$

donde $d \equiv |\mathbf{d}_{12}|$ y hemos definido la función de distribución normalizada

$$f(\omega) \equiv \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2} . \quad (9.11)$$

La radiación incidente no es aproximadamente monocromática, sino que tiene un espectro de frecuencias incoherente, con una distribución en frecuencias mucho más ancha que $f(\omega)$, centrada en ω_0 . Dado que estamos considerando que la radiación es incoherente, la probabilidad de transición total (debida a todas las componentes del espectro) es aproximada por la suma de las probabilidades de transición individuales, es decir la integral de (9.10) sobre todo el rango de frecuencias ⁷. Así, definiendo la función $F(\omega) \equiv \frac{\pi d^2}{3\epsilon_0 \hbar^2} u(\omega)$, la tasa de transición de los procesos estimulados se escribe

$$W_{12}^E = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega F(\omega) \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2} . \quad (9.12)$$

Si la intensidad de la radiación incidente tiene un ancho mucho mayor que γ , entonces el resultado es muy bien aproximado por la integral de la función Lorentziana multiplicada por el factor $F(\omega_0)$, es decir ⁸

$$W_{12}^E = W_{21}^E = \frac{\pi d^2}{3\epsilon_0 \hbar^2} u(\omega_0) \equiv B_{21} u(\omega_0) = B_{12} u(\omega_0) , \quad (9.13)$$

donde hemos definido los coeficientes

$$B_{21} = B_{12} \equiv \frac{\pi d^2}{3\epsilon_0 \hbar^2} .$$

⁶Ver por ejemplo en D.J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall (1995).

⁷Bajo esta suposición, obtenemos la probabilidad de transición por unidad de tiempo como suma de probabilidades y no sumando previamente amplitudes de probabilidad.

⁸Notemos que para alcanzar el resultado (9.13) debemos suponer que la función Lorentziana es muy aguda, es decir que $\gamma \ll \omega_0$. Bajo esas condiciones podemos extender el límite de integración a $-\infty$ y usar la normalización.

Entonces la ecuación de balance para el sistema de dos niveles sujeto a radiación es de la forma

$$\frac{dp_1}{dt} = [W_{21}^{Sp} + B_{21}u(\omega_0)] p_2 - B_{21}u(\omega_0) p_1 . \quad (9.14)$$

En el estado estacionario se cumple $\frac{dp_1}{dt} = \frac{dp_2}{dt} = 0$, de donde surge la condición para los coeficientes

$$p_2^o A_{21} - B_{21}[p_1^o u(\omega_0) - p_2^o u(\omega_0)] = 0 , \quad (9.15)$$

donde hemos denominado $A_{21} \equiv W_{21}$. Por razones históricas, A_{21} y B_{21} se denominan *coeficientes de Einstein*.

Los mismos resultados se obtienen cuando la radiación incidente corresponde a la radiación térmica de equilibrio, y en un caso general, ambos tipos de radiación podrían estar presentes,

$$u(\omega) = u(\omega)_T + u(\omega)_E , \quad (9.16)$$

es decir que en un experimento típico la densidad de radiación es suma de la radiación térmica y de la radiación proveniente de fuentes externas. Por ejemplo, podríamos transmitir un haz de radiación a través de una cavidad a temperatura T , y medir la fracción de la intensidad inicial que sobrevive.

Es posible encontrar relaciones importantes entre los coeficientes de Einstein, A_{21} y B_{21} , considerando la situación de equilibrio térmico del átomo con la radiación térmica circundante. Para ese caso, las probabilidades de ocupación estacionarias de los niveles corresponden al equilibrio térmico, y $u(\omega_0)$ es la densidad de radiación térmica de Planck, $u(\omega_0) = u(\omega_0)_T$

$$u(\omega_0)_T = \frac{\hbar\omega_0^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} - 1} , \quad (9.17)$$

$$p_2^{eq}[A_{21} + B_{21}u(\omega_0)_T] = p_1^{eq} B_{21}u(\omega_0)_T . \quad (9.18)$$

De la ecuación anterior podemos despejar el valor del coeficiente A_{21} en función de B_{21} . Teniendo en cuenta que $p_2^{eq}/p_1^{eq} = e^{\frac{(E_1 - E_2)}{k_B T}} = e^{\frac{-\hbar\nu}{k_B T}}$, se obtiene directamente la relación entre los coeficientes:

$$A_{21} = \frac{\hbar\omega_0^3}{c^3 \pi^2} B_{21} . \quad (9.19)$$

Históricamente, Einstein planteó la condición de equilibrio (9.18) con coeficientes B_{12} y B_{21} en principio diferentes (aún no se había desarrollado la

mecánica cuántica). De la comparación entre la densidad de radiación $u(\omega_0)_T$ extraída de (9.18) con la correspondiente distribución de equilibrio de Planck, surge que la igualdad a todas las temperaturas es posible únicamente si $B_{12} = B_{21}$ y vale la relación (9.19).

Antes de utilizar ecuaciones de balance del tipo de (9.15), conjuntamente con los coeficientes de Einstein, para el estudio de diversos procesos radiativos, es conveniente examinar las naturalezas y magnitudes relativas de los tres tipos de transiciones radiativas, de tal forma de poder realizar aproximaciones adecuadas para procesos específicos.

A partir de la Ec.(9.18) podemos despejar el cociente de las probabilidades de transición por unidad de tiempo de los dos tipos de procesos, estimulados y espontáneo, en función del número medio de fotones correspondientes al modo de frecuencia ω_0 , n_{ω_0} :

$$\frac{u(\omega_0)_T B_{12}}{A_{21}} = n_{\omega_0} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} - 1} \quad (9.20)$$

A temperatura ambiente, $T = 300K$, $n_{\omega_0} = 1$ para la frecuencia $\omega_0^c = 3 \times 10^{11} s^{-1}$, ó equivalentemente $\hbar\omega_0^c/k_B T \simeq 0.7$. Así,

- Para frecuencias $\omega_0 \ll \omega_0^c$, $\hbar\omega_0 \ll k_B T$ ($n_{\omega_0} \gg 1$) y por lo tanto $A_{21} \ll B_{12}u(\omega_0)_T$ (microondas y radiofrecuencias).
- Para frecuencias $\omega_0 \gg \omega_0^c$, $\hbar\omega_0 \gg k_B T$ ($n_{\omega_0} \ll 1$) y por lo tanto $A_{21} \gg B_{12}u(\omega_0)_T$ (infrarojo cercano, *visible*, ultravioleta, rayos x).

Así, vemos que en el rango visible, las transiciones radiativas espontáneas son mucho más probables que las estimuladas térmicamente. Por lo tanto, en este rango de frecuencias es aceptable descartar la radiación térmica estimulada a temperatura ambiente, conservando solamente la radiación proveniente de fuentes externas.

9.4 El fenómeno LASER

9.4.1 Propiedades direccionales de los coeficientes de Einstein

Las propiedades direccionales de los coeficientes de Einstein pueden ser resumidas en la Figura 9.3

La luz producida por emisión estimulada en átomos excitados surge en el mismo modo \vec{k} que la luz que provoca la emisión estimulada. Así, la emisión estimulada tiende a amplificar la intensidad del haz incidente. Por otro lado,

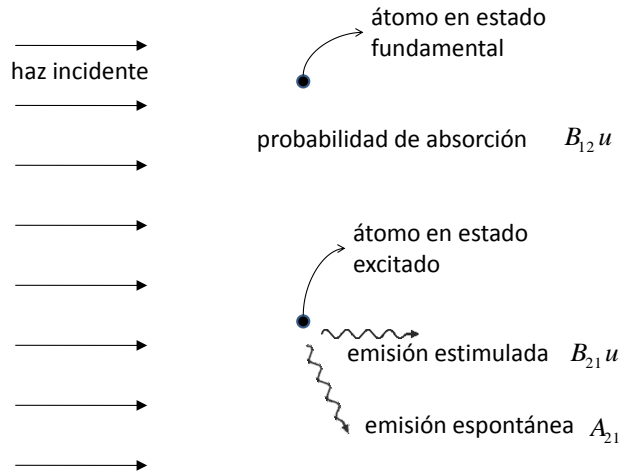


FIGURE 9.3: . Propiedades direccionales de los procesos de transición fundamentales.

la radiación espontánea es completamente independiente de la luz incidente, por lo que la dirección de propagación, polarización y fase de la luz emitida espontáneamente son arbitrarias. A medida que el haz atraviesa el gas atómico, los procesos de absorción remueven fotones. Los átomos así excitados vuelven eventualmente a sus estados fundamentales, reponiendo fotones en el haz por emisión estimulada. Si únicamente ocurrieran estos dos procesos estimulados, el haz pasaría a través de los átomos sin cambios de intensidad una vez que se lograra un estado estacionario. Sin embargo, dado que una parte de los fotones es re-emitida espontáneamente en todas las direcciones, una fracción

$$\frac{A_{21}}{A_{21} + B_{21}u} \equiv \frac{1}{1 + \frac{u}{u_s}} \quad (9.21)$$

de la luz absorbida se dispersa. En la ecuación anterior

$$u_s \equiv \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \quad \text{y} \quad u_s B_{21} = A_{21}.$$

Este proceso de "scattering" es la fuente microscópica de la absorción de luz del haz incidente durante su pasaje a través del gas atómico.

9.4.2 Excitación óptica de “átomos de dos niveles”

Los estados atómicos excitados en el rango visible tienen escasa población térmica (probabilidad de ocupación) a temperatura ambiente, en el estado de equilibrio. Consideremos átomos con un estado fundamental de energía E_1 y un estado excitado correspondiente a frecuencias visibles o mayores, de energía E_2 . Se puede lograr una excitación selectiva por irradiación con luz de una fuente externa de frecuencia $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$, y considerar al sistema aproximadamente como un sistema de dos niveles (más adelante trataremos el caso de tres niveles al discutir el fundamento del LASER). A partir de la ecuación (9.8) y el razonamiento posterior, la ecuación de balance para este sistema de dos niveles es de la forma:

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{dN_2}{dt} = N_2A + (N_2 - N_1)Bu \quad (9.22)$$

donde hemos denominado N_1 y N_2 a los *números medios de ocupación* de los niveles de energía, y omitimos los subíndices en los coeficientes de Einstein; u es la densidad de energía a frecuencia ω en un haz de luz provisto por una fuente externa. Asumimos que u corresponde a un modo electromagnético de una cavidad con dirección y polarización bien definidas. Suponemos que u es una cantidad fija, independiente del tiempo y la posición en la cavidad. Consideremos en primer lugar, el estado estacionario de la Ec. (9.22), es decir

$$N_2^e A + (N_2^e - N_1^e)Bu = 0. \quad (9.23)$$

Aplicando en la ecuación anterior la relación $u_s B = A$ resulta

$$N_2^e u_s + (N_2^e - N_1^e)u = 0. \quad (9.24)$$

Teniendo en cuenta que $N_1^e + N_2^e = N$, podemos obtener finalmente los valores de equilibrio de las poblaciones de los niveles de energía:

$$N_1^e = \frac{A + Bu}{A + 2Bu} N = \frac{u_s + u}{u_s + 2u} N = \frac{1 + Bu/A}{1 + 2Bu/A} N \quad (9.25)$$

y

$$N_2^e = \frac{Bu}{A + 2Bu} N = \frac{u}{u_s + 2u} N = \frac{Bu/A}{1 + 2Bu/A} N \quad (9.26)$$

La Figura 9.4 ilustra la dependencia de los números de ocupación con la densidad de energía. Allí se ve que recién para valores muy grandes de la densidad de energía las poblaciones estacionarias se igualan.

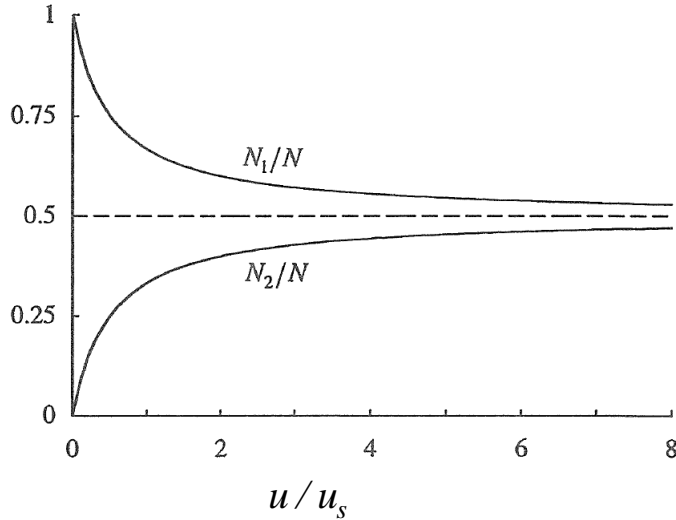


FIGURE 9.4: . Poblaciones estacionarias de los niveles en función de la energía del campo.

Ahora analicemos la *dinámica* de las poblaciones de los niveles de energía. La solución de la Ec.(9.22), junto con $N = N_1 + N_2$ arroja:

$$N_1(t) = \left\{ N_1(0) - N \frac{u_s + u}{u_s + 2u} \right\} \exp\{-(A + 2Bu)t\} + N \frac{u_s + u}{u_s + 2u}. \quad (9.27)$$

Si suponemos que en $t = 0$ (al encenderse la lámpara externa) todos los átomos se encuentran en el nivel fundamental, el número medio de átomos en el nivel excitado es

$$N_2(t) = N \frac{u}{u_s + 2u} \{1 - \exp\{-(A + 2Bu)t\}\} = N_2^e \{1 - \exp\{-(A + 2Bu)t\}\}. \quad (9.28)$$

Vemos que ambas poblaciones alcanzan sus valores de equilibrio exponencialmente con la misma tasa de relajación

$$T_R^{-1} \equiv A + 2Bu \quad (9.29)$$

La energía es transferida a los átomos desde el haz de luz cuando es recién encendido, y crece la población del estado excitado, hasta que se produce un estado estacionario en el que los procesos de absorción y emisión se equilibran.

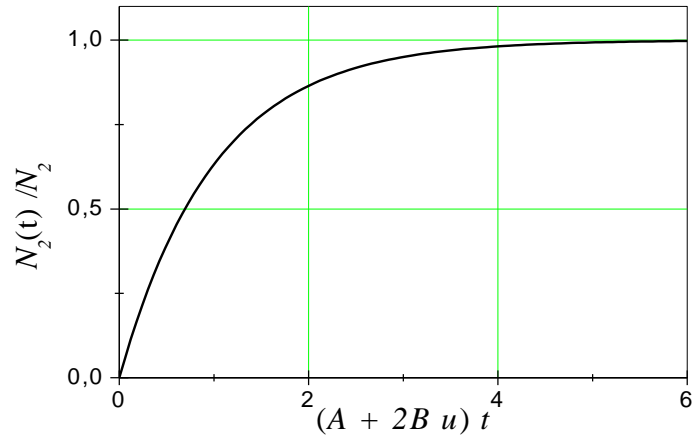


FIGURE 9.5: . Relajación de la población del nivel excitado al valor del estado estacionario

Este proceso de equilibración ocurre por la influencia combinada del campo externo y los procesos de relajación descritos por las ecuaciones de balance. Un análogo ‘mecánico’ al proceso de absorción de energía electromagnética del campo por parte de los átomos lo encontramos en la absorción de energía por parte de un resorte en oscilaciones amortiguadas forzadas. Allí el proceso microscópico de relajación es provisto por los mecanismos que generan la fricción⁹. La Figura 9.5 muestra la dinámica de la población del nivel excitado para un valor de u .

Si ahora se interrumpe la energía del haz, los átomos excitados retornan al estado fundamental debido al proceso de “relajación” provisto por la emisión espontánea. Si en $t = 0$ se corta el haz, entonces

$$\frac{dN_2}{dt} = -N_2 A, \tag{9.30}$$

y la evolución de la población para $t > 0$ es

$$N_2(t) = N_2(0) e^{-tA} \equiv N_2(0) e^{\frac{-t}{T_{sp}}}, \tag{9.31}$$

⁹Consultar, por ejemplo, el libro de Mecánica, de Landau y Lifshitz.

donde T_{sp} es el “tiempo de vida radiativo”. Entonces, los átomos decaen emitiendo fotones de frecuencia ω , y la luz emitida decae en intensidad con el tiempo característico T_{sp} . La observación de este proceso permite medir el coeficiente de Einstein A .

9.4.3 Atenuación óptica

Los procesos considerados hasta ahora en la sección anterior, asumen una densidad de energía radiativa u independiente de la posición. La atenuación de un haz de luz debido a las pérdidas por la emisión espontánea, hace que su densidad de energía y su intensidad decaigan con la distancia de propagación. Ahora utilizaremos la teoría de Einstein para derivar expresiones “microscópicas” para la tasa de atenuación en términos de los coeficientes de Einstein. Seguiremos suponiendo que solamente el estado fundamental y el primer estado excitado están significativamente poblados, y consideraremos el modelo sencillo de átomos de dos niveles para estudiar la absorción de la luz. Asumimos que el gas está diluido con índice de refracción igual a uno, por lo que los coeficientes A y B obtenidos previamente considerando el espacio libre, siguen siendo válidos, sin necesidad de modificaciones por las propiedades dieléctricas del gas.

Consideremos un haz de luz consistente en una onda viajera y estudiemos el proceso de atenuación desde el punto de vista microscópico. Asumiendo que se alcanzó el estado estacionario (las poblaciones no cambian con el tiempo), podemos escribir la ecuación de balance

$$N_2 A = (N_1 - N_2) B u. \quad (9.32)$$

(Omitimos por simplicidad el supraíndice que designa las poblaciones en el estado estacionario). El lado izquierdo de la ecuación anterior, expresa la tasa a la cual se dispersan fotones del haz por emisión espontánea (los fotones son emitidos en todas las direcciones). El lado derecho es la diferencia de la tasa con que fotones del haz se pierden por ser absorbidos y los que son retornados al haz por emisión estimulada. Obviamente, ambos términos deben ser iguales para satisfacer la condición de estacionariedad. Esta relación será de utilidad para calcular la tasa de atenuación, pero antes debemos refinar nuestra descripción para tener en cuenta que las transiciones electrónicas no son exactamente monocromáticas a frecuencia ω , ya que la probabilidad de transición tiene un ancho γ alrededor de la frecuencia principal, introducido por los campos fluctuantes del medio circundante, lo que produce un ensanchamiento de frecuencias de absorción y emisión, descrito por la función de distribución o “forma de línea” (lineshape) $f(\omega)$ (ver Ec.(9.11)), definida de tal forma que

9.4. EL FENÓMENO LASER

$f(\omega)d\omega$ es la fracción de transiciones para la cual la frecuencia del fotón emitido o absorbido cae en un pequeño rango $\omega, \omega + d\omega$, y está normalizada, $\int_0^\infty f(\omega)d\omega = 1$.

Debido a la atenuación del haz de luz, la densidad de energía del campo electromagnético depende de la coordenada correspondiente a la dirección de propagación, digamos z . La energía, por unidad de volumen, de los fotones que están contenidos en el intervalo $(\omega, \omega + d\omega)$ es $\frac{\hbar\omega f(\omega)}{V}$. Por otro lado, como vimos recién, la tasa con que se pierden fotones de frecuencia ω es $(N_1 - N_2)Bu(\omega)$. Así, la tasa neta de cambio de la densidad de energía del haz, en la coordenada z es

$$\frac{\partial u}{\partial t}(z) = \frac{(N_1 - N_2)}{V} Bu(\omega) f(\omega) \hbar\omega . \quad (9.33)$$

Es decir, en condiciones estacionarias, hay una tasa de pérdida de energía que depende de la coordenada z , dada por la ecuación (9.33). Introduciendo en la ecuación anterior las expresiones para las poblaciones de equilibrio (9.25) y (9.26), obtenemos

$$\frac{\partial u}{\partial t}(z) = \frac{u_s}{u_s + 2u} \frac{N}{V} Bu(\omega) f(\omega) \hbar\omega . \quad (9.34)$$

La cantidad de energía dispersada del haz por radiación espontánea, por unidad de tiempo, correspondiente a un volumen Adz , donde A es el área atravesada por el haz, se obtiene multiplicando la expresión anterior por este volumen:

$$\frac{\partial u}{\partial t} Adz = \frac{u_s}{u_s + 2u} \frac{N}{V} Bu(\omega) f(\omega) \hbar\omega Adz . \quad (9.35)$$

Para expresar la atenuación en función de la distancia, consideramos la intensidad de energía I del haz, es decir la energía por unidad de área y tiempo que atraviesa un plano perpendicular a la dirección de propagación del haz. La variación de la intensidad I a lo largo de la distancia dz puede relacionarse con la Ec. (9.35) a través del balance de energía por unidad de tiempo en la Fig. (9.6):

$$I(z)A - I(z + dz)A - \frac{\partial u}{\partial t} Adz = 0 , \quad (9.36)$$

por lo que se satisface la ecuación

$$\frac{\partial I}{\partial z} = - \frac{\partial u}{\partial t} . \quad (9.37)$$

Si además tenemos en cuenta la relación existente entre intensidad y densidad de energía, $I = cu$, obtenemos finalmente la ecuación

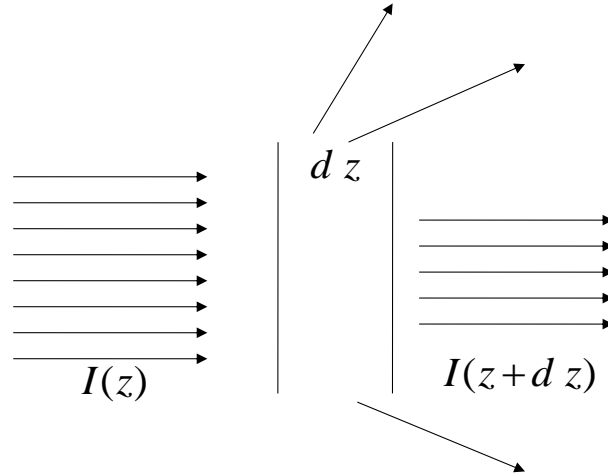


FIGURE 9.6: Atenuación del haz en función de la distancia de propagación.

$$\frac{\partial I}{\partial z} = -\frac{u_s}{u_s + \frac{2I}{c}} \frac{N}{V} f(\omega) B \hbar \omega \frac{I}{c}. \quad (9.38)$$

Si definimos $I_s \equiv cu_s$ y $K(\omega) \equiv \frac{N}{V} \frac{f(\omega) B \hbar \omega}{c}$, la ecuación anterior se escribe sintéticamente en la forma:

$$\frac{\partial I}{\partial z} = -\frac{I_s I}{I_s + 2I} K(\omega), \quad (9.39)$$

es decir

$$\frac{1}{I} \frac{\partial I}{\partial z} \left(1 + \frac{2I}{I_s}\right) = -K(\omega). \quad (9.40)$$

La solución general de (9.40) es de la forma

$$\ln \frac{I(z)}{I(0)} + 2 \frac{I(z) - I(0)}{I_s} = -K(\omega)z. \quad (9.41)$$

En el caso límite en el que la intensidad del haz es mucho menor que I_s , el segundo término del primer miembro de (9.41) es pequeño, por lo que podemos aproximar la dependencia de la intensidad con la distancia por

$$I(z) = I(0)e^{-K(\omega)z} . \quad (9.42)$$

La ecuación anterior revela que el haz va atenuando su intensidad con la distancia exponencialmente, y que este comportamiento está caracterizado por el coeficiente de atenuación $K(\omega)$. Para un gas de átomos de dos niveles, el haz siempre se atenúa ya que $N_1 > N_2$, y la diferencia de poblaciones no puede ser invertida. Veremos que este objetivo puede lograrse considerando un sistema de niveles atómicos más complejo, por ejemplo un sistema de tres niveles de energía.

9.4.4 Inversión de poblaciones. Amplificación óptica

Si el número de átomos excitados, N_2 , puede ser hecho más grande que el número de átomos N_1 en el estado fundamental, entonces se podría lograr que la intensidad del haz crezca con la distancia recorrida a través del gas, es decir tendríamos un coeficiente de atenuación negativo (ver Ec.(9.33)). La condición $N_2 > N_1$ se denomina *inversión de poblaciones* (o temperatura negativa). Ya vimos que esta condición no puede lograrse mediante absorción resonante de luz en el esquema simple de dos niveles. Sin embargo, la inversión de poblaciones de un par de niveles de energía puede lograrse en experimentos que utilizan uno o más niveles adicionales de energía. Discutiremos el caso más simple, es decir un sistema de tres niveles de energía no degenerados.

Consideremos un sistema de tres niveles de energía E_1 , E_2 , y E_3 , no degenerados, con poblaciones N_1 , N_2 y N_3 . El tercer nivel no es un "nivel laser", sino que es utilizado para transferir efectivamente población al segundo nivel, por lo que se trata de un nivel ancho (o un conjunto de niveles anchos), con tiempo de vida corto. Mediante aplicación de radiación de banda ancha alrededor de la frecuencia correspondiente a los niveles E_3 y E_1 , es posible excitar átomos desde el nivel fundamental hasta el tercer nivel. Los átomos excitados a este nivel superior decaen rápidamente al segundo nivel mediante procesos no radiativos, entregando la energía a la red (por ejemplo en forma de vibraciones)¹⁰. El segundo nivel es metaestable, y los átomos de ese nivel decaen al nivel fundamental luego de un tiempo mayor que el tiempo de vida de ese nivel (relativamente largo comparado con el del tercer nivel), emitiendo luz correspondiente a la frecuencia $\omega_2 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$. Como veremos enseguida, incrementando la tasa de bombeo es posible invertir las poblaciones de los niveles E_2 y E_1 , de manera que los primeros pocos fotones emitidos

¹⁰En este tipo de procesos, el átomo decae sin emisión de fotones, transfiriendo su energía a otros grados de libertad, como los movimientos traslacionales, vibracionales o rotacionales de los átomos o moléculas vecinas.

espontáneamente pueden generar una reacción en cadena de transiciones estimuladas.

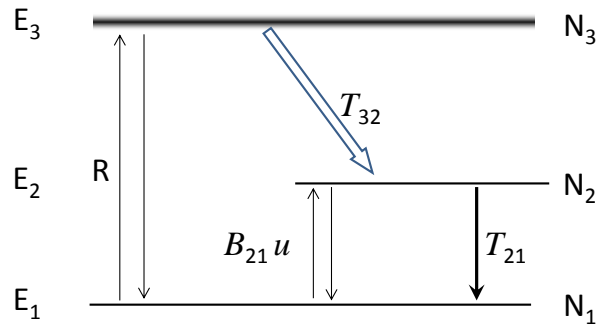


FIGURE 9.7: Sistema de tres niveles.

De manera análoga al análisis del sistema de dos niveles, consideremos ahora las ecuaciones dinámicas de las poblaciones, e impongamos la condición de estacionareidad:

$$N = N_1 + N_2 + N_3 \quad (9.43)$$

$$\frac{dN_3}{dt} = R(N_1 - N_3) - T_{32}N_3 \quad (9.44)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = B_{21}u(N_1 - N_2) + T_{32}N_3 - T_{21}N_2 \quad (9.45)$$

$$\frac{dN_1}{dt} = B_{21}u(N_2 - N_1) + R(N_3 - N_1) + T_{21}N_2 \quad (9.46)$$

En las ecuaciones anteriores hemos definido las tasas de las transiciones espontáneas T_{32} y T_{21} . También, asumiendo que la tasa de transición de salida del tercer nivel se debe preferentemente a la transición hacia el segundo nivel, hemos descartado el término $T_{31}N_3$. Imponiendo la condición estacionaria sobre las ecuaciones dinámicas para las poblaciones, es directo deducir una expresión

para la diferencia de poblaciones estacionaria de los niveles E_1 y E_2

$$\frac{N_2 - N_1}{N} = \frac{R(T_{32} - T_{21}) - T_{32}T_{21}}{3RB_{21}u + 2B_{21}uT_{32} + 2RT_{21} + T_{32}T_{21} + RT_{32}} \quad (9.47)$$

ó

$$\frac{N_2 - N_1}{N} = \frac{R(T_{32} - T_{21}) - T_{32}T_{21}}{(3R + 2T_{32})B_{21}u + 2RT_{21} + T_{32}T_{21} + RT_{32}} \quad (9.48)$$

En la ecuación anterior vemos que para que haya inversión de población, necesariamente debe satisfacerse que $T_{32} > T_{21}$. En ese caso, hay una tasa de bombeo mínima

$$R_m = \frac{T_{32}T_{21}}{T_{32} - T_{21}}$$

necesaria para que se produzca la inversión. Suponiendo que se cumple, además, que $T_{32} \gg T_{21}$, entonces la tasa de bombeo mínima es $R_m \simeq T_{21}$. Bajo las mismas aproximaciones, la Ec.(9.48) se transforma en

$$\frac{N_2 - N_1}{N} = \frac{\frac{R - T_{21}}{R + T_{21}}}{1 + \frac{3R + 2T_{32}}{T_{32}(R + T_{21})}uB_{21}}. \quad (9.49)$$

El resultado obtenido para la diferencia de poblaciones estacionaria es formalmente similar al caso de dos niveles, pero con la importante característica de que ahora la diferencia puede ser positiva, dependiendo de los valores relativos de las probabilidades de transición. Cuando u es muy pequeña porque la densidad de fotones es muy baja, la inversión de poblaciones es prácticamente independiente de u , y la diferencia de poblaciones se escribe aproximadamente

$$\frac{N_2 - N_1}{N} = \frac{R - T_{21}}{R + T_{21}}. \quad (9.50)$$

Así, siguiendo el mismo análisis realizado anteriormente en el caso de dos niveles, vemos que para valores pequeños de la densidad de energía, la dependencia de la intensidad de energía como función de la coordenada *crece* exponencialmente

$$I(z) = I(0)e^{G(\omega)z}, \quad (9.51)$$

donde $G(\omega)$ es el coeficiente de *amplificación* o factor de ganancia

$$G(\omega) = \frac{(R - T_{21})}{(R + T_{21})} \frac{N}{V} \frac{f(\omega)B_{21}\hbar\omega}{c}. \quad (9.52)$$

El factor de amplificación es generalmente pequeño, pero esa característica puede ser compensada aumentando el recorrido del haz estimulado. Para generar radiación intensa utilizando el principio de amplificación de luz que hemos discutido, se ubica el medio amplificador (el gas atómico en nuestro caso) en una cavidad que posee dos espejos enfrentados en los extremos. Los espejos cumplen dos objetivos. Por un lado, permiten que el recorrido del haz que se amplifica aumente debido a las reflexiones múltiples (como en un interferómetro de Fabry-Perot) compensando la pequeñez del factor de ganancia. Además, ajustando la longitud de la dimensión de la cavidad a lo largo de la que se propaga el haz es posible seleccionar de forma muy precisa un modo de resonancia de la cavidad, que puede tener un factor de calidad muy alto (ancho espectral muy bajo). De esa forma es posible lograr que la luz producida en el amplificador tenga un espectro mucho más angosto que el ancho natural asociado con las transiciones espontáneas.

La radiación que viaja por el medio avanza y rebota entre los espejos es amplificada y también sufre pérdidas debido a la reflectividad imperfecta de los espejos, y a otras pérdidas por dispersión y difracción por tamaño finito de los espejos. Si las oscilaciones deben ser mantenidas en la cavidad, entonces las pérdidas deben ser compensadas exactamente por la ganancia. Así, para vencer las pérdidas se requiere una mínima inversión de poblaciones, lo que se denomina *umbral de inversión de población*.

Para obtener una expresión para el umbral de ganancia (y por lo tanto el umbral de población), representemos por d la longitud del resonador y por R_1 y R_2 las reflectividades de los espejos. Sea α la pérdida promedio por unidad de longitud debido a todos los factores de pérdida distintos de la reflectividad finita. Consideremos una radiación con intensidad I_0 que abandona el espejo M_1 . Al propagarse a través del medio, cuando llega al otro espejo el haz es amplificado por e^{Gd} , y también sufre una pérdida, que asumimos representada por la ley $e^{-\alpha d}$. La intensidad del haz reflejado en el segundo espejo será $I_0 R_2 e^{(G-\alpha)d}$. Un segundo recorrido a través del resonador y reflexión en el primer espejo lleva a una intensidad de la radiación después de un viaje completo de $I_0 R_1 R_2 e^{2(G-\alpha)d}$. Así, para que las oscilaciones laser comiencen debe satisfacerse

$$R_1 R_2 e^{2(G-\alpha)d} \geq 1, \quad (9.53)$$

ó

$$G \geq \alpha - \frac{\ln(R_1 R_2)}{2d}. \quad (9.54)$$

La igualdad da el valor del umbral de ganancia para G (y por lo tanto para la inversión de población). Cuando el amplificador laser se estabiliza y oscila en

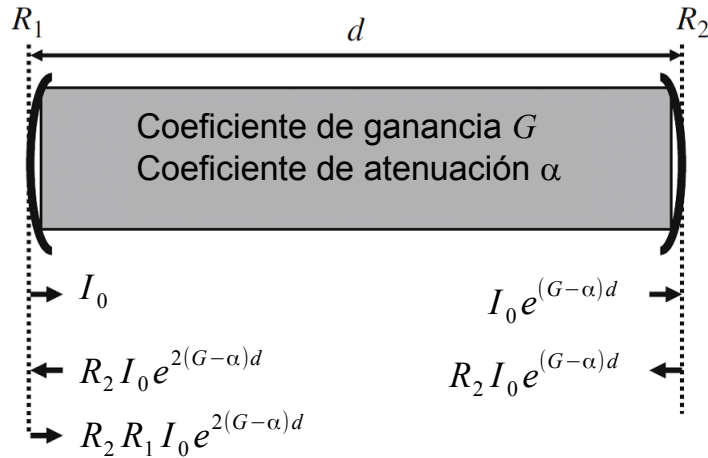


FIGURE 9.8: Esquema de cavidad resonante.

un estado estacionario con una oscilación de onda continua, vale la igualdad en la ecuación (9.53). Si la inversión de población es incrementada el lado izquierdo toma valores mayores que uno, lo que implica que la ganancia es mayor que las pérdidas en el viaje completo. Esto resultaría en el crecimiento de la intensidad en la cavidad hasta que tiene lugar el efecto de la saturación, produciendo una disminución en la inversión (ver Ec.(9.49). Así, la ganancia es retrotraída a su valor correspondiente al umbral. Si uno de los dos espejos es semitransparente, se puede obtener un haz de salida útil desde este espejo. Entonces, las oscilaciones comenzarán cuando la ganancia del material activo compense las pérdidas, incluyendo la pérdida 'intencional' debido a la extracción del haz de salida.¹¹

El efecto de saturación es responsable, en el estado estacionario del laser, de la estabilización de la intensidad. Por ejemplo, cuando se dá un crecimiento momentáneo de la intensidad con respecto a su valor estacionario, el efecto de saturación provocará una disminución de la inversión de las poblaciones, lo que implicará a su vez una emisión más débil atenuando el pico de la intensidad. Similarmente, una caída instantánea de intensidad se verá amortiguada por un

¹¹Debido a que en general el medio activo tiene una ganancia muy baja, el espejo de salida debe ser muy reflectivo para favorecer la amplificación laser. Debido a ello, generalmente la transmisividad de ese espejo es del orden del 1%.

incremento de la inversión, inducido por la disminución de la intensidad.

Finalmente, estimemos la potencia mínima necesaria para comenzar las oscilaciones del laser. El número de átomos bombeados por unidad de tiempo desde el nivel fundamental es $R_m N_1$, por lo que la energía bombeada por unidad de tiempo, es decir la potencia P , necesaria para comenzar las oscilaciones es

$$P_{min} = R_m N_1 \hbar \omega_R \simeq T_{21} N_1 \hbar \omega_R, \quad (9.55)$$

donde $\omega_R = \frac{E_3 - E_1}{\hbar}$. Asumiendo que T_{21} corresponde a la transición espontánea, entonces $T_{21} = T_{sp}^{-1}$. Usualmente la inversión de población requerida es muy pequeña, y N_3 es muy pequeño, por lo que la potencia puede ser aproximada por

$$P_{min} \simeq T_{sp}^{-1} \frac{N}{2} \hbar \omega_R. \quad (9.56)$$

Si tomamos los valores representativos $N \simeq 1.6 \times 10^{19} \frac{1}{cm^3}$, $T_{sp} = 3 \times 10^{-3} \text{seg}$ y $\omega_R = 3.9 \times 10^{15} s^{-1}$, obtenemos que la potencia estimada teóricamente es $P_{min} \simeq 1100 \frac{W}{cm^3}$.

9.5 Apéndice

En esta sección se expone de manera sintética el razonamiento para obtener la ecuación (9.8), en base al formalismo de la matriz densidad en el regimen markoviano.

Cuando el átomo está en contacto con un ambiente o reservorio, el Hamiltoniano que describe el sistema completo es de la forma (9.5)

$$H = H_S + H_R + H_{SR},$$

con

$$H_S = H_{at} + V(t), \quad (9.57)$$

donde $V(t) = V \cos \omega t$ es el Hamiltoniano que corresponde a la interacción del átomo con un modo del campo electromagnético de frecuencia ω , H_{at} es el Hamiltoniano atómico y H_{SR} es el Hamiltoniano que representa el acoplamiento del átomo con el reservorio.

La dinámica del átomo (sistema observado), queda descrita por el operador densidad reducido ρ_S (ver Eq. (4.25)),

$$\rho_S = \text{Tr}_R \rho, \quad (9.58)$$

siendo ρ el operador densidad del sistema completo.

La condición de markovianicidad para la interacción entre el átomo y su ambiente implica esencialmente asumir que existe una escala de tiempo caracterizada por intervalos Δt en la que es posible describir la dinámica de ρ_S , tal que $\tau \ll \Delta t \ll T_1$, donde τ simboliza un tiempo de correlación característico del ambiente y T_1 representa genéricamente un tiempo de decaimiento o relajación de un observable del sistema observado. El cumplimiento de esta condición depende de la naturaleza de los sistemas y su interacción, y físicamente implica que el acople es débil (la correlación cuántica entre el sistema y el ambiente es pequeña). Bajo estas condiciones, la ecuación (9.6) representa la dinámica del sistema observado.

Los elementos diagonales y no diagonales del operador densidad reducido del átomo satisfacen las siguientes ecuaciones, en la base del Hamiltoniano atómico, en la representación de Schrödinger ¹²:

$$(\dot{\rho}_S)_{mm} = -\frac{i}{\hbar} \langle m | [V(t), \rho_S(t)] | m \rangle + \sum_{m \neq n} (\rho_S(t))_{nm} W_{nm} - (\rho_S(t))_{mm} \sum_{m \neq n} W_{mn} \quad (9.59)$$

¹²Asumimos, como es usual, que V es no diagonal en la base de H_S .

$$(\dot{\rho}_S)_{mn} = -\frac{i}{\hbar}\langle m|[V(t), \rho_S(t)]|n\rangle - \gamma_{mn} (\rho_S(t))_{mn} \quad (m \neq n), \quad (9.60)$$

donde W_{nm} , W_{mn} y γ_{mn} son cantidades constantes, que caracterizan la dinámica irreversible del sistema observado generada por el acople del sistema con el ambiente a través de H_{SR} . W_{nm} y W_{mn} son las tasas de transición entre los estados del sistema atómico, mientras que γ_{mn} representa la tasa de pérdida de la coherencia $(\rho_r)_{mn}$ ¹³. Para el caso específico de nuestro interés, consideraremos que estos coeficientes están asociados con las fluctuaciones del vacío. La influencia de la radiación electromagnética sobre la dinámica de (ρ_r) será considerada por separado, como veremos enseguida.

Las ecuaciones de evolución para la matriz densidad reducida son entonces

$$(\dot{\rho}_S)_{mm} = -\frac{i}{\hbar}\langle m|[V(t), \rho_S(t)]|n\rangle + \sum_{m \neq n} (\rho_S(t))_{nn} W_{nm} - (\rho_S(t))_{mm} \sum_{m \neq n} W_{mn} \quad (9.61)$$

y

$$(\dot{\rho}_S)_{mn} = -i\omega_{mn}(\rho_S(t))_{mn} - \frac{i}{\hbar}\langle m|[V(t), \rho_S(t)]|n\rangle - \gamma_{mn} (\rho_S(t))_{mn} \quad (m \neq n), \quad (9.62)$$

donde $\omega_{mn} \equiv \frac{E_m - E_n}{\hbar}$. La idea es estudiar las ecuaciones (9.61) para los elementos diagonales (las ‘poblaciones’). Sin embargo, vemos que la presencia del conmutador acopla las ecuaciones (9.61) y (9.62). Examinando el término de radiación de (9.61), vemos que es de la forma

$$(\dot{\rho}_S)_{mm}^{rad} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n \{ \langle m|V(t)|n\rangle \langle n|\rho_S|m\rangle - \langle m|\rho_S|n\rangle \langle n|V(t)|m\rangle \}. \quad (9.63)$$

Generalmente se asume que $V(t)$ es un operador no-diagonal en la base del Hamiltoniano atómico. En ese caso, solamente los elementos no diagonales de la matriz densidad reducida intervienen en la ecuación anterior. A su vez, esos elementos satisfacen (9.62).

Por simplicidad aplicaremos este análisis a un átomo con dos niveles de energía, en presencia de radiación dipolar. Supondremos que el acople del átomo con el ambiente está asociado preponderantemente con las fluctuaciones

¹³En Resonancia Magnética Nuclear (RMN), las tasas de transición definen el tiempo de relajación espín-red T_1 , mientras que el decaimiento de la coherencia está reflejado en el parámetro conocido como T_2 .

9.6. BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

de vacío del campo electromagnético, por lo que solamente debemos considerar transiciones espontáneas desde el nivel superior al nivel inferior, con tasa W_{21}^{Sp} . Integrando las ecuaciones (9.62) y luego reemplazando en (9.61), obtenemos ¹⁴

$$(\dot{\rho}_S)_{22} = -(\dot{\rho}_S)_{11} = \frac{1}{2\hbar^2} |\langle 2|V|1\rangle|^2 \frac{\gamma}{(\omega - \omega_{21})^2 + \gamma^2} [(\rho_S)_{11} - (\rho_S)_{22}] - (\rho_S)_{22} W_{21}^{Sp}. \quad (9.64)$$

Vemos que el término de radiación contribuye a la variación temporal de los elementos diagonales de la matriz densidad de manera análoga a la contribución de la emisión espontánea, es decir en la forma de balance con una tasa independiente del tiempo, dependiente del factor de pérdida de la coherencia, γ , originado también en los procesos de fluctuaciones del vacío. Para obtener el resultado anterior, se hizo uso de la aproximación secular, es decir se descartaron términos rápidamente oscilatorios en la integración de las ecuaciones maestras. Esta es una aproximación básica de la teoría de procesos markovianos. También, por simplicidad formal se descartó una pequeña contribución al corrimiento de la frecuencia de resonancia proveniente de la parte compleja de los coeficientes γ_{mn} (conocido como corrimiento de Lamb).

Así, reagrupando los términos de la ecuación anterior, se obtienen finalmente las ecuaciones (9.8)

$$(\dot{\rho}_S)_{22} = -(\dot{\rho}_S)_{11} = \frac{1}{2\hbar^2} \frac{|\langle 2|V|1\rangle|^2 \gamma}{(\omega - \omega_{21})^2 + \gamma^2} (\rho_S)_{11} - \left[\frac{1}{2\hbar^2} \frac{|\langle 2|V|1\rangle|^2 \gamma}{(\omega - \omega_{21})^2 + \gamma^2} + W_{21}^{Sp} \right] (\rho_S)_{22}, \quad (9.65)$$

donde identificamos las tasas de transición estimuladas

$$W_{12}(\omega) = W_{21}(\omega) = \frac{1}{2\hbar^2} |\langle 2|V|1\rangle|^2 \frac{\gamma}{(\omega - \omega_{21})^2 + \gamma^2}. \quad (9.66)$$

9.6 Bibliografía recomendada

- K. Blum, *Density Matrix, Theory and Applications*, 3^{er} Ed. (2012).
- R. Loudon, *The Quantum Theory of Light*, 3^{er} Ed. (2000).
- K. Thyagarajan and A. Ghatak, *Laser. Fundamentals and applications*, 2^{da} Ed. Springer (2010).

¹⁴Los lineamientos de este cálculo pueden encontrarse en K. Blum, capítulo 8. En nuestro caso, particularizamos el análisis para el caso en que el acople del átomo con el ambiente se da mediante la interacción con el vacío del campo electromagnético.

- C. Gerry and P. Knight, *Introductory Quantum Optics*, Cambridge University Press (2005).
- O. Svelto, *Principles of Laser*, 5^{ta} Ed. Springer (2010).
- E. Hecht, *Optics*, 4^{ta} Ed. Addison Wesley (2002).