XXI ESCUELA DE VERANO EN FÍSICA

junio 17-28, 2013

Instituto de Física, UNAM, 17-22 de junio Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, 24-28 de junio

Editores

José Récamier Rocío Jáuregui



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO 2014

Esta edición fue preparada por el Instituto de Física y el Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM.

Primera edición electrónica: 3 de diciembre de 2014

D.R. © 2014 UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO Ciudad Universitaria, 04510, México D. F. Instituto de Física Instituto de Ciencias Físicas

Prohibida la reproducción parcial o total por cualquier medio sin autorización escrita de su legítimo titular de derechos.

ISBN: 978-607-02-6181-7

Hecho en México

CONTENIDO

Introducción	5 7 9 11 13
Contribuciones	
Sergio Cuevas y Aldo Figueroa Advección caótica y mezclado de fluidos	15
O. Flores, F. Castillo, B. Campillo, H. Martínez <i>Plasmas y aplicaciones</i>	41
Gabriel Germán El mecanismo de Higgs	59
Agustín E. González El proceso de maduración cristalina en cristales coloidales en 2D	67
Alfredo Herrera Las dimensiones extra y algunos problemas de la física moderna	81
Guillermo Hinojosa La Física de las barras de error	105
Rocío Jáuregui Control de estados cuánticos de radiación y materia	111
Antonio M. Juárez Técnicas de detección de trazas moleculares para diagnóstico médico no invasivo	123
Eugenio Ley Koo Vórtices estacionarios armónicos	133
José S. Pérez, G. Ortíz y W. L. Mochán La función dieléctrica macroscópica de sistemas estructurados: caso 1D	143

José Récamier Estados coherentes dependientes del tiempo con fotones añadidos	169
Bruno Ullrich Optical properties of PbS quantum dots	177

INTRODUCCIÓN

La XXI Escuela de Verano en Física fue organizada por el Posgrado en Ciencias Físicas, el Instituto de Física y el Instituto de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Autónoma de México. Se llevó a cabo en las instalaciones del Instituto de Física, en Ciudad Universitaria, del 17 al 22 de junio y en las instalaciones del Instituto de Ciencias Físicas, en Cuernavaca, Morelos, del 23 al 28 de junio de 2013.

En esta escuela se impartieron 8 cursos de 5 horas de duración cada uno y 25 conferencias. Los cursos y conferencias cubrieron un amplio espectro con temas como cosmología, plasmas, biofísica molecular, óptica cuántica, nanotecnología, mecánica cuántica, sistemas complejos, mezclado de fluidos y biología teórica, entre otros.

> Rocío Jáuregui, Instituto de Física José Récamier, Instituto de Ciencias Físicas Universidad Nacional Autónoma de México *Ciudad Universitaria, marzo, 2014*

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a Ulises Amaya por el apoyo con la página de la escuela.

Agradecemos los apoyos recibidos para la realización de esta escuela a la Universidad Nacional Autónoma de México a través de la Coordinación de la Investigación Científica, del Instituto de Física (IF) y del Instituto de Ciencias Físicas (ICF). Agradecemos también al programa de Becas de Movilidad Santander-Universia y a las Becas ECOES.

PROFESORES PARTICIPANTES

- Maximino Aldana González, ICF, *Historias de terror en la evolución: Super bacterias resistentes a antibióticos.*
- Jorge Ascencio Gutiérrez, ICF, Nanotecnología.
- María Ester Brandan Siqués, IF, *Resta de imágenes mamográficas digitales para obtener información funcional.*
- Bernardo Campillo Illanes, FQ, Descargas en gases y aplicaciones.
- Rolando Castillo Caballero, IF, Materia condensada blanda.
- Fermín Castillo Mejía, ICF, Descargas en gases y aplicaciones.
- Juan Carlos Cheang Wong, IF, Introducción a las nanociencias: materiales, métodos de síntesis y caracterización.
- Carmen Cisneros Gudiño, ICF, Algunas aplicaciones de láser.
- Sergio Cuevas García, IER, Advección caótica y mezclado de fluidos.
- Axel de la Macorra Pettersson, IF, El mundo obscuro.
- Jaime de Urquijo Carmona, ICF, Plasmas de baja temperatura: Esencia y aplicaciones.
- Osvaldo Flores Cedillo, ICF, Descargas en gases y aplicaciones.
- Jorge Flores Valdés, IF, Variaciones sobre un tema de Lagrange.
- Jorge Fujioka, IF, Solitones ópticos.
- Gabriel Germán Velarde, ICF, El mecanismo de Higgs.
- Agustín González Flores, ICF, Sobre el proceso de maduración cristalina.
- Rocío Jauregui Renaud, IF, Control de estados cuánticos de radiación y materia.
- Alfredo Herrera Aguilar, ICF, *Las dimensiones extra y algunos problemas de la física moderna.*
- Guillermo Hinojosa Aguirre, ICF, La física de las barras de error.
- Antonio Juárez Reyes, ICF, *Técnicas de detección de trazas molecular para diagnóstico médico no invasivo.*

- Hernán Larralde Ridaura, ICF, *Caminatas aleatorias*.
- Eugenio Ley Koo, IF, Vórtices estacionarios armónicos.
- Gustavo Martínez Mekler, ICF, *La fecundación desde la perspectiva de los sistemas complejos*.
- Horacio Martínez Valencia, ICF, Descargas en gases y aplicaciones.
- Guerda Masillon, IF, Interacción ionizante y no ionizante con materia.
- W. Luis Mochan Backal, ICF, Bandas fotónicas desde un punto de vista macroscópico.
- Rosario Paredes Gutiérrez, IF, Localización de Anderson versus estados fuera de equilibrio en fluidos cuánticos inhomogéneos.
- Myriam Mondragón Ceballos, IF, Teorías de más allá (del modelo estandard).
- Iván Ortega Blake, ICF, Biofísica molecular.
- Guillermo Ramírez Santiago, IF, *El papel de las fuerzas y transporte molecular en los procesos de comunicación celular*.
- Alejandro Ramírez Sols, FC UAEM, *Estudios ab initio y DFT del Oxígeno sólido a altas presiones. La transición de fase epsilon-dzeta a 96 GPa explicada.*
- Saúl Ramos, IF, Supersimetría: un camino hacia la gran unificación.
- José Récamier Angelini, ICF, Estados coherentes con fotones añadidos.
- Luis Rodríguez Fernández, IF, Conceptos básicos de la interacción radiación-materia.
- José Luis Ruvalcava Sil, IF, *Técnicas espectroscópicas no destructivas aplicadas al estudio de objetos históricos.*
- Genaro Toledo Sánchez, IF, El mundo segun los quarks.
- Bruno Ullrich, ICF, Optical properties of PbS quantum dots.
- Carlos Villagómez Ojeda, IF, *Acceso a un átomo y una molécula individual por el microscopio de efecto túnel y fuerza atómica.*

INTITUCIONES PARTICIPANTES

- ICF Instituto de Ciencias Físicas, U.N.A.M.
- IER Instituto de Energías Renovables, U.N.A.M.
- IF Instituto de Física, U.N.A.M.
- FQ Facultad de Química, U.N.A.M.
- FC UAEM Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

ALUMNOS PARTICIPANTES

- Luis Alberto Abrego Rangel, Facultad de Ciencias, UNAM.
- Diego Ignacio Alonso Vargas, Facultad de Ciencias, UNAM.
- Isaac Aarón Andrés Pérez, Facultad de Ciencias, U. de G.
- José Miguel Blancas Flores, Facultad de Ciencias, U. de G.
- Mariana Carrillo González, Facultad de Ciencias, UAEMor.
- Luis Miguel Casiano Calles, Inst. Tecnológico de Zacatepec.
- Sergio Contreras Arredondo, Facultad de Ciencias, U. de Gto.
- Christian Esparza López, Facultad de Ciencias UNAM.
- José Luis González Murguía, Facultad de Ciencias, U. Autónoma de Yucatán.
- Claudia Itzel Jáuregui Caballero, Facultad de Ciencias, UAEMex.
- Elia Melissa Jiménez Gutiérrez, Facultad de Ciencias, U. de G.
- Alejandra Jiménez Rosales, Facultad de Ciencias, UNAM.
- Dulce María Magdaleno Arroyo, Facultad de Ciencias, U. Gto.
- David Landa Marbán, Facultad de Ciencias, UNAM.
- Susana Marín Aguilar, Facultad de Ciencias, UAEMex.
- Miguel Ángel Mendoza Mejía, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, U. Coahuila.
- Ángel Salvador Miramontes López, Facultad de Ciencias, U. de G.
- José Luis Moxca Mochka, Facultad de Ciencias, UABC.
- Noemí Ochoa Mejía, Facultad de Ciencias, UAEMex.
- César Emmanuel Olmedo Martínez, Facultad de Ciencias, U. Autónoma de Chihuahua.
- José Arturo Olvera Santamara, Facultad de Ciencias, BUAP.
- Paola Berenice Ortíz Sánchez, Facultad de Ciencias, UASLP.

- Luis Enrique Padilla Albores, Facultad de Ciencias, U. de G.
- Rúben Pavia Hernández, Facultad de Ciencias, BUAP.
- Adriana Pérez Martínez, Facultad de Ciencias, BUAP.
- Giovanni Emmanuel Plata Zanatta, Facultad de Ciencias, UAEMex.
- Emmanuel Romero Carreño, Facultad de Ciencias, Universidad Veracruzana.
- Manuel Velasco Juan, Facultad de Ciencias, UNAM.
- Sarai Zárate Gálvez, Facultad de Ciencias, U. de G.

Advección Caótica y Mezclado de Fluidos

Sergio Cuevas García¹ y Aldo Figueroa Lara²

¹Instituto de Energías Renovables, UNAM, Temixco, Morelos, 62580 México ²Facultad de Ciencias, UAEM, Cuernavaca, Morelos, 62209 México

1. Introducción

El mezclado de fluidos es uno de los procesos físicos más comunes en la Naturaleza y de mayor utilidad en diversas aplicaciones tecnológicas. Se presenta en una multitud de escalas de longitud que abarcan desde escalas muy grandes, como es el caso del mezclado en el interior de las estrellas, o bien a escala planetaria, en la atmósfera o el océano, hasta escalas muy pequeñas, milimétricas o micrométricas, como el mezclado que tiene lugar en los diminutos vasos sanguineos o en los dispositivos *microfluidicos*. A su vez, los diferentes procesos de mezclado involucran una gran cantidad de escalas temporales que van de los miles o millones de años, por ejemplo en los procesos geológicos, a las fracciones de segundo, como en los procesos de combustión. No obstante esta variedad de escalas, existen mecanismos que son comúnes en estos procesos.

Comprender el mezclado de fluidos es en general bastante difícil y requiere, a la par, de herramientas teóricas y experimentales elaboradas. Un ejemplo cotidiano que ilustra en esencia el proceso de mezclado en fluidos podemos encontrarlo cuando vertemos una gota de leche o crema en una taza de café negro [1]. Si agitamos suavemente con una cuachara, podemos observar que en un inicio se forman patrones estriados hasta que eventualmente la crema y el café se homogeneizan formando una mezcla uniforme de color marrón. Lo que está en juego en este proceso son los mecanismos fundamentales del mezclado, es decir, la advección y la difusión. La difusión se presenta aun en ausencia de movimiento del fluido. Por ejemplo, cuando vertemos la gota de leche en el café en reposo, suponiendo que la perturbación introducida por ésta es despreciable, la leche se mezcla debido al mecanismo de difusión molecular. Sabemos por experiencia que en este caso el mezclado tomará mucho más tiempo que cuando utilizamos la cuchara y agitamos el fluido, activando entonces el mecanismo advectivo que lleva a una homogeneización mucho más rápida.

Antes de presentar cómo podemos describirlo y entenderlo, veamos qué es lo que comunmente entendemos por mezclado. Mezclar implica manipular un sistema físico heterogéneo con la intención de volverlo más homogéneo [2]. Normalmente al mezclar introducimos desorden en un sistema inicialmente ordenado. De hecho, el objetivo del mezclado es crear *aleatoriedad* en la distribución de una cierta cantidad física, por ejemplo, la concentración de una sustancia. En el ejemplo anterior, la gota de crema introducida en el café negro tiene inicialmente una concentración muy alta en una región espacial muy pequeña, pero después de agitar el fluido la crema se distribuye de manera homogénea logrando una mezcla en donde la concentración de esta sustancia es uniformemente baja. El mezclado entonces conlleva el transporte de una cantidad física, en este caso la masa, caracterizada por la concentración. Uno de los objetivos centrales del análisis del mezclado en fluidos es entender cómo una concentración inicial no homogénea es homogeneizada y predecir la tasa a la que este proceso tiene lugar. Un rasgo fundamental de los procesos de mezclado es su naturaleza irreversible.

En muchas aplicaciones tecnológicas o cotidianas, como en los sistemas de combustión, la elaboración de pinturas o la preparación de alimentos o bebidas, se busca llevar a cabo el proceso de mezclado de manera *óptima*. Por ejemplo, al mezclar, el objetivo puede ser producir la máxima cantidad de área interfacial entre dos fluidos inicialmente segregados, utilizando para ello el menor tiempo posible o usando la mínima cantidad de energía. El aumentar el área interfacial trae consigo un mayor contacto entre los fluidos y por tanto un mejor transporte. Por otra parte, en ocasiones se desea evitar o controlar el mezclado tanto como sea posible, como ocurre en los derrames accidentales de petróleo en el océano. En cualquier caso, el entendimiento profundo de este fenómeno es de fundamental importancia para poder manipularlo.

2. Mecanismos del mezclado

Las características del mezclado dependen en gran medida de régimen de flujo en el que tiene lugar, es decir, laminar o turbulento. Comúnmente dicho régimen se determina a partir del valor del número de Reynolds, Re = UL/v, donde U y L representan escalas características de velocidad y longitud y v es la difusividad viscosa del fluido, también conocida como viscosidad cinemática. El número de Reynolds se interpreta como el cociente de las fuerzas inerciales y las viscosas y toma valores muy grandes (Re >> 1) cuando el flujo es turbulento; en tal caso, dominan las fuerzas inerciales sobre las viscosas. A su vez, los flujos a bajos números de Reynolds (Re << 1) son laminares. Sin embargo, ésta no es una definición precisa y los límites que determinan la transición entre un flujo laminar y uno turbulento dependen del flujo en particular. En este trabajo consideraremos únicamente el mezclado que tiene lugar en flujos laminares. Aunque es sabido que los flujos turbulentos producen un mezclado eficiente, veremos que bajo ciertas condiciones los flujos laminares pueden llevar también a un buen mezclado.

Veamos ahora con más detalle los mecanismos involucrados en el mezclado laminar. El primero es el mecanismo advectivo o convectivo que se presenta cuando se agita un fluido. La agitación (*stirring*, en inglés) ocasiona que las interfaces entre los materiales se estiren, aumentando el área interfacial entre ellos y creando estructuras estriadas o filamentarias. Así, los filamentos de fluido generados por el movimiento del medio se estiran y doblan consecutivamente incrementando su longitud con el tiempo. De hecho, la escala de longitud del proceso se determina por el grado de estiramiento de los filamentos. Este fenómeno es lo que en inglés se conoce como *stretching and folding*, que podríamos traducir como *estiramiento y plegado*. Lo que en un inicio era una gota de un fluido en otro, al cabo de un tiempo se convierte en filamentos que se estiran y doblan y cuyos grosores no son todos iguales.



Figura 1: (a) Experimento realizado por Welander [3] donde se muestra la evolución de un colorante a partir de una forma cuadrada debido a un movimiento del fluido esencialmente bidimensional. (b) Experimento realizado por Ottino [4] donde se muestran las estructuras estriadas de un colorante en un fluido formadas por el estiramiento y plegado ocasionado por la rotación de dos cilindros excéntricos.

La figura 1(a) muestra uno de los experimentos pioneros, realizado por Welander [3], donde se muestra este proceso. Welander utilizó un tanque de agua que rotaba lentamente de modo que se establecía un movimiento en el fluido cercanamente bidimensional. Mediante un colorante que se difundía muy lentamente, marcó un cuadrado que dejó evolucionar libremente de acuerdo al flujo impuesto. En la figura se muestra el colorante a distintos tiempos, observando que el cuadrado inicial evoluciona en un patrón espacial altamente ramificado, donde se forman filamentos alargados con una estructura muy fina. Es importante a resaltar que a pesar de lo intrincado de los patrones, el flujo que los produce es laminar, no turbulento. La figura 1(b) muestra otro experimento famoso realizado por J. Ottino [4] donde se coloca un colorante o marcador dentro de otro fluido contenido entre dos cilindros excéntricos los cuales pueden rotar. El movimiento de los cilindros lleva a la formación de los filamentos que se estiran y doblan, generando zonas donde hay un buen mezclado y otras donde el colorante está ausente, llamadas *islas*. Al crear y estirar los filamentos de fluido, la agitación tiende a incrementar el valor medio de cualquier gradiente inicial [5], por ejemplo, el gradiente de concentración de la sustancia. En ocasiones, si el filamento ha sido suficientemente estirado, las diferencias en la tensión interfacial en los lados opuestos de una interfaz pueden ocasionar que los filamentos se rompan en gotas aisladas, reduciendo la escala de longitud [1]. En líquidos muy viscosos o cuando los materiales son muy similares este rompimiento puede no tener lugar.

El otro aspecto importante en el mezclado es la difusión que es un proceso molecular. Si los fluidos son miscibles, el movimiento Browniano de las moléculas individuales de fluido ocasionado por las fluctuaciones térmicas, actúa con el fin de homogeneizar al fluido a escala molecular [1]. En la figura 2(a) se muestra una simulación de la trayectoria aleatoria que sigue una partícula sujeta a un movimiento Browniano. A su vez, en la figura 2(b) se observa el efecto de la difusión cuando un gota de colorante se introduce en un recipiente con agua en reposo. De hecho, el efecto de la difusión es disminuir el valor medio de cualquier gradiente inicial [5]. Por supuesto, la difusión no tiene lugar si los fluidos son incompatibles.

Resumiendo, mientras que la advección es un proceso mecánico, la difusón es un proceso molecular. La advección y la difusión no necesariamente se presentan juntas en una determinada situación. En las etapas iniciales del mezclado, los efectos convectivos (estiramiento y plegado) son los que dominan, llevando a la creación de estructuras filamentarias. El grosor de los filamentos decrece exponencialmente con el tiempo hasta que se alcanza un equilibrio en el cual la difusión empieza a ser significativa, deteniendo el adelgazamiento de los filamentos y propiciando la homogeneización de la concentración. Por su parte, la viscosidad tiende a detener la agitación antes de que se obtenga un mezclado apreciable, a menos de que se contrarreste mediante otros medios, por ejemplo, mediante un forzamiento permenente del flujo. Comúnmente, los campos de velocidad estacionarios llevan a un mezclado pobre, es decir un mezclado localizado solo en una región específica. Por su parte, los campos de velocidad dependientes del tiempo ocasionan un mezclado extensivo, es decir, un buen mezclado.

Una manera de caracterizar los mecanismos físicos involucrados en el proceso de mezclado, es a través de un parámetro adimensional conocido como el número de Péclet, definido como



Figura 2: (a) Trayectoria aleatoria seguida por una partícula sujeta a un movimiento similar al que se presenta en el movimiento Browniano ocasionado por la agitación térmica molecular. (b) Difusión de una gota de tinta en un recipiente con agua en reposo.

$$Pe = \frac{UL}{\mathscr{D}},$$

donde U y L son escalas características de velocidad y longitud, respectivamente, y \mathscr{D} es la difusividad de masa del material, cuyas unidades, como todas las difusividades, son m^2/s . Este número también es utilizado en procesos de transferencia de calor, en donde el coeficiente D se intercambia por la difusividad térmica. El número de Péclet, puede interpretarse como una estimación de la magnitud del transporte advectivo entre el transporte difusivo. Por tanto, cuando tenemos un proceso en donde Pe >> 1, la advección domina sobre la difusión, mientras que cuando Pe << 1, la difusión es el mecanismo de transporte dominante. Otra interpretación útil del número de Péclet se obtiene a partir de las escalas temporales que caracterizan el proceso de mezclado. De esta forma, Pe se calcula como el cociente del *tiempo difusivo*, caracterizado por una escala de orden L^2/\mathcal{D} , entre el tiempo inercial o advectivo, dado por L/U, entonces $Pe = (L^2/\mathcal{D})/(L/U) =$ UL/\mathcal{D} . En fluidos, comúnmente el número de Péclet es muy grande por lo que se tienen valores en el rango $Pe \approx 10^6 - 10^{10}$. Físcamente, la condición Pe >> 1 implica que el estiramiento de la interfaz del fluido debido a la advección, tiene lugar durante una gran cantidad de tiempo antes de que los efectos difusivos eventualmente suavicen la interfaz y mezclen los fluidos a pequeña escala.

Otro parámetro adimensional de utilidad en los procesos de mezclado es el número de

Schmidt que está dado como el cociente de los números de Reynolds y Péclet, es decir,

$$Sc = \frac{Re}{Pe} = \frac{v}{\mathscr{D}}.$$

Vemos entonces que el número de Schmidt depende sólo de las propiedades del fluido, es decir, del cociente de las difusividades viscosa y de masa. La *longitud de penetración* del momentum en un proceso difusivo puede estimarse de la forma $\delta_v \approx (vt)^{1/2}$, mientras que la longitud de penetración de la concentración puede estimarse como $\delta_{\mathscr{D}} \approx (\mathscr{D}t)^{1/2}$. Por tanto, la raiz cuadrada del número de Schmidt puede interpretarse como el cociente de la rapidez de propagación del momentum (i.e. la rapidez con la que el movimiento se difunde o muere) entre la rapidez de propagación de la concentración de la concentración (i.e. la rapidez con la que la rapidez con la que la concentración se suaviza) [1], es decir,

$$Sc^{1/2} = \frac{d\delta_v/dt}{d\delta_\mathscr{D}/dt}.$$

En líquidos comúnmente se tiene que Sc >> 1, lo que implica que las fluctuaciones de concentración sobreviven sin ser borradas por el mezclado mecánico o advectivo hasta tiempos largos en el proceso [1].

3. Enfoques para el análisis del mezclado

Cuando deseamos analizar la homogeneización de tinta o de una impureza en un campo de flujo preescrito, hablamos de mezclado escalar. En tal caso, consideramos lo que se conoce como una cantidad escalar *pasiva*, por ejemplo, la concentración de la tinta, que es transportada por el flujo. El adjetivo *pasiva* denota que la sustancia transportada no altera el campo de flujo original, sino que actúa pasivamente dejándose llevar hacia donde dicte el flujo impuesto. Esencialmente existen dos enfoques para el estudio del mezclado que se asocian a las dos maneras utilizadas para describir el movimiento en la dinámica de fluidos: los enfoques Lagrangiano y Euleriano [6].

Enfoque Lagrangiano

El enfoque Lagrangiano consiste en determinar la trayectoria de las partículas o parcelas de fluido inmersas en el flujo. Este enfoque es muy similar al enfoque cinemático utilizado al describir la trayectoria de las partículas sólidas en la mecánica clásica. Lo que se hace es *etiquetar* o marcar a las partículas pasivas mediante condiciones iniciales dadas y perseguirlas durante su movimiento, impuesto por un campo de velocidad determinado. Como mencionamos antes, una partcula pasiva (o inerte) es aquella que no afecta el campo de velocidad y que simplemente sigue el movimiento del fluido. La suposición básica del enfoque Lagrangiano es que la velocidad de la partícula es igual a la velocidad del fluido [5], es decir,

$$\boldsymbol{u}_{particula} = \boldsymbol{u}_{fluido}.$$
 (1)

De la mecánica clásica, sabemos que la velocidad de la partícula está dada en la forma

$$\boldsymbol{u}_{particula} = \frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \left(\frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{dz}{dt}\right),\tag{2}$$

mientras que el campo de velocidad, como veremos más adelante, se obtiene de la solución de las ecuaciones de balance o bien del experimento, y puede expresarse en la forma

$$\boldsymbol{u}_{fluido} = [u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t)],$$
(3)

donde u, v y w son las componentes del campo de velocidad, en general dependientes de la posición y del tiempo. La condición expresada en la ecuación (1), lleva entonces a las ecuaciones advectivas:

$$\frac{dx}{dt} = u(x, y, z, t), \quad \frac{dy}{dt} = v(x, y, z, t), \quad \frac{dz}{dt} = w(x, y, z, t). \tag{4}$$

Aplicando condiciones iniciales dadas, es posible determianr la trayectoria de las partículas individuales resolviendo las ecuaciones (4). La determinación de las trayectorias de la partículas también se conoce como *seguimiento Lagrangiano* ya que lo que se está haciendo es perseguir a las partículas en su movimiento impuesto por el campo de flujo. Aref [7] hace notar que las ecuaciones (4) reducen el problema advectivo a un sistema dinámico de dimensión finita. Cuando se considera advección turbulenta, el sistema está gobernado por ecuaciones de movimiento estocásticas, mientras que para un flujo laminar el sistema (4) es determinista. Dichas ecuaciones, evidentemente, no consideran el transporte difusivo, es decir, son puramente advectivas.

Enfoque Euleriano

El enfoque Euleriano es una descripción de *campo*, es decir, una descripción basada en la evolución de una cantidad física, en este caso el campo escalar (pasivo) de concentración de una sustancia, c, que toma valores en cada punto del espacio y a cada tiempo. Dada una distribución espacio-temporal de la concentración $c(\mathbf{x},t)$, el flujo de masa \mathbf{j}_m está dado por una ley fenomenológica conocida como la ley de Fick,

$$\boldsymbol{j}_m = -\mathscr{D}\nabla c, \tag{5}$$

que establece la proporcionalidad del flujo de masa y el gradiente de concentraciones, siendo la difusividad de masa, \mathcal{D} , el coeficiente de proporcionalidad. Si utilizamos la

ley de Fick y la ley de conservación de la masa, en ausencia de movimiento de fluido, obtenemos la ecuación de difusión para la concentración, es decir,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \mathscr{D}\nabla^2 c, \tag{6}$$

donde se ha supuesto que el coeficiente \mathscr{D} permanece constante, lo que es una aproximación común. Si existe movimiento de fluido, entonces la concentración satisface ahora la ecuación de advección-difusión dada por

$$\frac{\partial c}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)c = \mathscr{D}\nabla^2 c, \tag{7}$$

donde el segundo término del lado izquierdo denota el transporte advectivo, siendo $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t)$ un campo de velocidad conocido. La ecuación (7) puede describir el transporte laminar o turbulento, de acuerdo con la naturaleza del campo de velocidad \boldsymbol{u} . Comúnmente, al analizar el transporte laminar se introduce un campo de flujo determinista, mientras que para el transporte turbulento el campo de flujo \boldsymbol{u} se especifica probabilísticamente [7].

Determinación del campo de velocidad

Un requisito indispensable para llevar a cabo la descripción del mezclado escalar, tanto en el enfoque Lagrangiano (basado en determinar las trayectorias de las partículas de fluido) como en el Euleriano (basado en determinar la evolución del campo de concentración), es el conocimiento del campo de velocidad del fluido. Dicho campo puede obtenerse experimental o teóricamente y, en ciertos casos, su determinación podría involucrar dificultades mayores. Si se considera un fluido Newtoniano incompresible, el campo de velocidad puede obtenerse teóricamente resolviendo la ecuación de conservación de la masa o ecuación de continuidad, y la ecuación de balance de la cantidad de movimiento o ecuación de Navier-Stokes, que se expresan, respectivamente, en la forma

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0},\tag{8}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2 \boldsymbol{u} + \frac{1}{\rho}\boldsymbol{f},\tag{9}$$

donde ρ es la densidad de masa, p es el campo de presión y **f** es una fuerza externa específica por unidad de volumen (fuerza de cuerpo) que actúa sobre el fluido. Con excepción de algunos casos sencillos, comúnmente el problema dinámico que implica encontrar el campo de velocidad y el campo de presión a partir de la solución de las ecuaciones (8) y (9), requiere de un tratamiento numérico.

En la siguiente sección describiremos brevemente una manera no intrusiva de agitar fluidos eléctricamente conductores utilizando fuerzas electromagnéticas. Presentaremos



Figura 3: Dispositivo experimental. a) Vista de planta. b) Vista lateral, corte transversal, plano AA'. \mathbf{F}^0 denota la dirección principal de la fuerza de Lorentz de acuerdo a la dirección de la corriente aplicada.

algunos resultados experimentales y soluciones numéricas que permiten reproducir adecuadamente los campos de velocidad requeridos para realizar la descripción del mezclado escalar, utilizando tanto el enfoque Lagrangiano como el Euleriano.

4. Agitación electromagnética

Exite una gran variedad de métodos para agitar un fluido. Los más comunes hacen uso de métodos mecánicos para lograr el movimiento del medio, por ejemplo, utilizando aspas, como en una licuadora, o bien moviendo las paredes del recipiente que lo contiene [8]. También es posible agitar un fluido imponiendo gradientes térmicos de modo que se produzca convección natural [9]. Una manera conveniente de lograr agitación en fluidos eléctricamente conductores, tales como los electrolitos y los metales líquidos, es utilizando fuerzas electromagnéticas. La idea básica es introducir una corriente eléctrica dentro del medio la cual interacciona con un campo magnético aplicado, dando lugar a una fuerza de cuerpo rotacional, la fuerza de Lorentz, que es capaz de agitar el fluido. Este método tiene la ventaja de ser no intrusivo y fácilmente realizable en laboratorio [10, 11].

Dispositivo y observaciones experimentales

La figura 3 muestra el dispositivo de laboratorio utilizado en el Instituto de Energías Renovables de la UNAM, para llevar a cabo experimentos de agitación electromagnética en electrolitos [11]. Esencialmente, el dispositivo experimental consiste de un contenedor rectangular de acrílico parcialmente lleno con una delgada capa de una solución de bicarbonato de sodio (NaHCO3) a una concentración de 8.6% en masa. El volumen total del electrolito es 400 cm³, teniendo la capa una altura de 4 mm. En dos de las paredes opuestas del contenedor se colocan electrodos de cobre a través de los cuales se aplica una corriente eléctrica alterna al fluido por medio de un generador de funciones. Debajo del contenedor se colocan uno o varios imanes permanentes que generan un campo magnético no homogéneo. La interacción de la corriente alterna y el campo magnético da lugar a una fuerza de Lorentz periódica que agita el fluido, produciendo un flujo oscilatorio [12]. Si la corriente aplicada es directa, la fuerza de Lorentz no depende del tiempo y da lugar a un flujo estacionario [10]. El movimiento generado se visualiza al introducir trazadores (colorantes de alimentos o fluoresceina) en la superficie del fluido, mientras que la obtención cuantitativa del campo de velocidad de los flujos se lleva a cabo con la técnica de Velocimetría por Imagenes de Partículas (o PIV por sus siglas en Ingés) [11]. La figura 4 muestra el campo vectorial de velocidad a distintas fases de oscilación del flujo producido por la interacción de una corriente alterna y un campo magnético dipolar. Dado que la corriente se aplica en la dirección x y la componente dominante del campo magnético está en dirección z, la fuerza oscila en dirección vertical (y), creando un vórtice dipolar oscilatorio. En esta figura se pueden apreciar los puntos elípticos (marcados con asteriscos) e hiperbólicos (marcados con cruces) presentes en el flujo, además de las trayectorias que siguen estos puntos al evolucionar el flujo; asimismo, se muestra el punto de máxima velocidad (instantánea) dentro del campo de velocidad.

Simulación numérica y comparación con resultados experimentales

La agitación electromagnética en electrolitos puede modelarse mediante la solución de las ecuaciones de continuidad (8) y de Navier-Stokes (9), tomando a la fuerza de Lorentz como término fuente [10]. Como se mencionó previamente, dicha fuerza se crea por la interacción del campo magnético tridimensional $\mathbf{B}^0 = \mathbf{B}^0(x, y, z)$ y la corriente eléctrica aplicada al sistema, que en general es una función del tiempo $\mathbf{j}^0 = \mathbf{j}^0(t)$, es decir $\mathbf{f} = \mathbf{j}^0 \times \mathbf{B}^0$. La figura 5 muestra la comparación de los perfiles de velocidad de la componente en dirección y (v(x, y, t)) obtenidos experimentalmente, con los resultados obtenidos de la solución numérica de las ecuaciones de balance. Con el fin de determinar la importancia de los efectos tridimensionales en el flujo, se realizaron simulaciones numéricas utilizando un modelo cuasi-bidimensional (que se justifica dado el pequeño espesor de la capa de fluido), así como un modelo completamente tridimensional [11, 12]. En la figura se puede observar que los perfiles de velocidad v(x, 0, t) son simétricos, mientras que los



Figura 4: Campo de velocidad experimental para el flujo producido por la interacción de una corriente alterna y un campo magnético dipolar. El punto negro • corresponde al punto de velocidad máxima instantánea. Los asteriscos * y cruces × denotan los puntos elípticos e hiperbólicos en el flujo, respectivamente, mientras que las líneas azules y rojas denotan sus trayectorias, respectivamente. Las fases de oscilación en las distintas gráficas son: a) $\varphi = 2/10 \pi$, b) $\varphi = 4/10 \pi$, c) $\varphi = 6/10 \pi$ and d) $\varphi = 8/10 \pi$. El cuadrado en la figura denota la localización del imán.



Figura 5: Componente vertical de la velocidad como función de la posición para el flujo producido por la interacción de una corriente alterna y un campo magnético dipolar. Los datos experimentales y numéricos están representados por símbolos y líneas, respectivamente, correspondientes a distintas fases (φ). Diamante rojo \diamond y líneas rojas: $\varphi = 2/10 \pi$; círculo azul \odot y líneas azules: $\varphi = 4/10 \pi$. a) v(x,0); b) v(0,y). Líneas continuas: modelo cuasi-2D; líneas punteadas: modelo 3D.

perfiles v(0, y, t) muestran una marcada asimetría dictada por la dirección principal del flujo originada por la fuerza aplicada. Tanto la predicción numérica cuasi-bidimensional como la tridimensional, presentan un acuerdo cuantitativo muy bueno con los resultados experimentales para diversos arreglos de imanes en un extenso rango de amplitud y frecuencia de corrientes. Esto indica que para las condiciones de flujo, los efectos tridimensionales son poco importantes y el movimiento se aproxima a la cuasi-bidimensionalidad. Podemos afirmar que la solución numérica de las ecuaciones de balance reproduce satisfactoriamente los principales efectos físicos observados experimentalmente.

5. Trayectorias Lagrangianas en flujos producidos por agitación electromagnética

Una vez conocido el campo de velocidad, es posible integrar las ecuaciones advectivas (4) para encontrar las trayectorias Lagrangianas. A continuación se muestra la comparación de observaciones experimentales con las trayectorias Lagrangianas calculadas numéricamente para los flujos cuasi-bidimensionales generados mediante fuerzas electromagnéticas oscilatorias, presentados en la sección anterior [11].

En la figura 6 se muestra el caso de un flujo producido por una fuerza electromagnéti-



(a) Visualización experimental



(b) Simulación numérica: seguimiento Lagrangiano

Figura 6: Flujo oscilatorio producido en una capa delgada de electrolito por una fuerza electromagnética que oscila en dirección vertical. La fuerza es producida por una corriente eléctrica alterna en dirección horizontal y el campo magnético dipolar, esencialmente normal al plano de la imagen, generado por un imán permenente marcado por un cuadrado en la figura 6(a).

ca oscilatoria que apunta en dirección vertical, generada por un campo magnético dipolar. En el experimento (figura 6(a)) se colocaron dos gotas de colorante, una verde y una roja, cerca de la región donde se localiza el imán permanente (marcado con un cuadrado en la figura 6), a cada lado de la línea vertical de simetría y se dejó evolucionar el flujo. Para realizar el seguimiento Lagrangiano numéricamente, como condición inicial se marcó una colección de partículas dispuestas sobre un círculo cuyo centro coincidía con el del imán permanente; en la mitad izquierda del círculo se colocaron partículas verdes y en la mitad derecha partículas rojas. Al evolucionar el flujo, las partículas describen las trayectorias mostradas en la figura 6(b). Con el fin de obtener trayectorias suaves, cuando dos partículas se separan más de una cierta distancia, numéricamente se *inyectan* partículas adicionales. Puede observarse que la simulación Lagrangiana reproduce adecuadamente las características del flujo experimental, particularmente la simetría respecto al eje vertical que muestra la distribución de los trazadores. Dicha simetría, que impide el transporte de masa entre los lados izquierdo y derecho, es ocasionada por la distribución simétrica de campo magnético producida por el dipolo. La diferencia principal con el experimento se debe a que numéricamente, el seguimiento Lagrangiano no considera la difusión y por tanto no captura el engrosamiento de los filamentos de fluido observados experimentalmente.



Figura 7: Flujo oscilatorio generado en una capa delgada de electrolito por una fuerza electromagnética que oscila verticalmente. La fuerza es producida por una corriente alterna horizontal y un campo magnético cuadrupolar, generado por dos imanes permenentes con polaridades opuestas (marcados en la figura 7(a)), cuyos centros se localizan sobre el eje vertical.

La figura 7 muestra el flujo resultante cuando el campo magnético utilizado es cuadrupolar, es decir, producido por dos imanes permanentes cuyos centros se localizan sobre el eje vertical y están separados una distancia 2L, donde L es la longitud del lado del imán. Al inicio del experimento se colocaron cuatro gotas de colorante de distinto color (verde, amarillo, azul y rojo) en cada cuadrante, mientras que numéricamente se dividió el círculo de partículas pasivas en los cuatro cuadrantes, cada uno con el color correspondiente al experimento. Observamos que la evolución del flujo da lugar a un mezclado por cuadrantes, en donde el transporte de masa entre cuadrantes se inhibe debido a la distribución simétrica de campo magnético. Nuevamente, la simulación Lagrangiana reproduce adecuadamente las características esenciales del flujo. Si se incrementa a cuatro el número de imanes, se produce un flujo octopolar oscilatorio donde se mantienen líneas de simetría que inhibien la homogeneidad del mezclado.



(a) Visualización experimental

(b) Simulación numérica: seguimiento Lagrangiano

Figura 8: Flujo oscilatorio producido en una capa delgada de electrolito por una fuerza electromagnética que oscila verticalmente. La fuerza es producida por una corriente alterna horizontal y el campo magnético generado por cinco imanes permanentes cuya distribución espacial y polaridad son irregulres. La localización de los imanes está marcada por cuadrados en la figua 8(a).

Los ejemplos anteriores muestran claramente que la existencia de simetrías en el flujo inhibe la homogeneización completa de los colorantes, dando lugar a un mezclado localizado. Una manera sencilla de romper las simetrías y propiciar un mejor mezclado es utilizando una distribución irregular de campo magnético, lo que se logra disponiendo un conjunto de imanes de manera desordenada y con polaridad no uniforme [11], como se muestra en la figura 8. En este caso se observa el transporte de masa en todas direcciones de modo que en unos pocos ciclos puede lograrse la homogeneización del colorante, lo que depende también, evidentemente, del número de imanes y de su distribución específica. Se ha mostrado experimentalmente que un arreglo aleatorio de imanes da buenos resultados [13].

Existen otras maneras de romper las simetrías en el flujo y lograr un mezclado más homogéneo sin necesidad de utilizar un flujo turbulento. Esto es importante porque hay situaciones físicas en donde la generación de turbulencia es prácticamente imposible, como ocurre en los dispositivos *microfluidicos*, es decir, dispositivos cuyo tamaño es del orden de los micrómetros, fabricados gracias a las técnicas de la microelectrónica [14]. Estos dispositivos tienen muchas aplicaciones médicas, biológicas y químicas, por ejemplo, en el análisis de compuestos o en la preparación de productos farmacéuticos a partir de una mínima cantidad de materia, en donde se requiere obtener rápidamente una mezcla homogénea de distintas componentes. La miocrofuidica se caracteriza por tratar siempre con flujos laminares dominados por la viscosidad, de manera que el número de Reynolds es mucho menor que la unidad. La manera de lograr un mezclado eficiente en estas condiciones es propiciando un flujo caótico, o más precisamente, un flujo en donde las partículas de fluido sigan trayectorias caóticas. Curiosamente esto es posible aun en campos de flujo sencillos y aparentemente inofensivos los cuales pueden dar lugar a patrones de advección altamente complejos. A continuación presentaremos brevemente algunas ideas acerca de este tema.

Advección caótica

En un artículo clásico, Aref [7] demostró que aun campos de velocidad completamente deterministas y que desde el enfoque Euleriano aparecen como flujos simples y regulares, son capaces de dar lugar a una respuesta esencialmente estocásitca en las trayectorias Lagrangianas producidas por la adevección de un trazador pasivo. Aref denominó a esta situación o régimen *advección caótica*.

En su análisis, Aref consideró campos de velocidad \boldsymbol{u} deterministas, bidimensionales, incompresibles y dependientes del tiempo. En un flujo incompresible en dos dimensiones, la ecuación de continuidad se expresa en la forma

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \tag{10}$$

lo cual implica que existe una función ψ , conocida como la función de corriente, que permite calcular las componentes de la velocidad como

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \tag{11}$$

de manera que se satisface la ecuación de continuidad. Si ahora escribimos las ecuaciones advectivas (4) en términos de la función ψ utilizando las ecuaciones (11), obtenemos

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad \frac{dy}{dt} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}.$$
(12)

Nótese que estas ecuaciones tienen la misma estructura que las ecuaciones canónicas de Hamilton para un sistema de un grado de libertad, donde la función de corriente ψ juega el papel del Hamiltoniano. Es decir, la cinemática de la advección en dos dimensiones en un flujo incompresible es equivalente a la dinámica Hamiltoniana de un sistema de

un grado de libertad [5]. Este hecho es idependiente de si el flujo es viscoso o inviscido (*i.e.* disipativo o no disipativo) ya que la naturaleza Hamiltoniana de la cinemática proviene únicamente de la condición de incompresibilidad. Lo que descubrió Aref [7] fue que aun en un campo de velocidad laminar y aparentemente sencillo, las trayectorias de las partículas pueden ser muy complejas y tener un comportamiento caótico. En otras palabras, vistas como un sistema dinámico, las ecuaciones advectivas pueden llevar a una dinámica caótica. Si se escoge el campo de flujo de tal manera que el sistema dinámico sea no integrable, lo cual en un flujo incompresible bidimensional es posible si el campo es dependiente del tiempo, los movimientos de las partículas individuales pueden producir trayectorias caóticas. Parafraseando a Aref, podemos decir que el mezclado de un fluido es la representación visual del comportamiento de un sistema caótico Hamiltoniano [5].

Para mostrar los rasgos esenciales de la advección caótica, Aref [7] estudió un modelo idealizado del movimiento de un fluido en un contenedor producido por un agitador. El fluido se supone inviscido e incompresible y el movimiento es completamente bidimensional. El agitador se modela como dos vórtices puntuales en una posición fija los cuales se "prenden y apagan"de manera periódica y alternada, dando lugar a un flujo dependiente del tiempo. Con dicho modelo, que se conoce como "vórtices parpadenates"(*blinking vortex*), Aref calculó numéricamente las trayectorias de las partículas y demostró su naturaleza caótica, logrando un mezclado eficiente.

Flujo generado por dos fuerzas de Lorentz ortogonales

Veamos ahora otra manera de romper las simetrías en los flujos generados por fuerzas electromagnéticas permitiendo, bajo ciertas condiciones, llegar a un régimen de advección caótica. Partiendo del dispositivo mostrado en la figura 3, la idea es colocar dos electrodos adicionales en las paredes donde antes no existían, evitando un corto circuito con el otro par de electrodos. De esta forma es posible aplicar corrientes alternas en direcciones ortogonales, es decir, vertical y horizontalmente, de modo que si existe un campo magnético aplicado se generarán fuerzas de Lorentz independientes en ambas direcciones.

En la figura 9 se muestra la comparación entre la visualización experimental y el cálculo numérico de las trayectorias Lagrangianas en un flujo producido por la acción de dos fuerzas de Lorentz periódicas y ortogonales que tienen un cociente de frecuencias igual a 2 y una fase relativa cero, cuando el campo magnético aplicado es generado por un solo dipolo magnético. Al comparar con el caso en donde existe solo una fuerza en dirección vertical (ver figura 6), observamos que la acción de dos fuerzas ortogonales permite el transporte de masa tanto en dirección vertical como horizontal, lo que da lugar al rompimiento de las simetrías y consecuentemente a un mejor mezclado.

Este sistema tiene propiedades interesantes que pueden explorarse tanto analítica como numéricamente [15]. Primero, si consideramos flujos en el régimen lineal, es decir, donde los efectos convectivos son despreciables, y nos enfocamos en la trayectoría de una so-



(a) Visualización experimental

(b) Simulación numérica: seguimiento Lagrangiano

Figura 9: Flujo oscilatorio producido en una capa delgada de electrolito por dos fuerza electromagnéticas oscilatorias en fase que actúan en direcciones ortogonales, con un cociente de frecuencias igual a 2. Las fuerzas son producidas por dos corrientes eléctricas alternas en direcciones vertical y horizontal y el campo magnético generado por un imán marcado por un cuadro en la figura (a).

la partícula colocada en el centro geométrico del sistema como condición inicial, puede demostrarse que dependiendo de los parámetros asociados a las corrientes aplicadas en direcciones horizontal y vertical (amplitud, frecuencia y fase), la partícula traza trayectorias que asemejan a las conocidas *figuras de Lissajous*. Estas figuras fueron observadas en 1855 por Jules Antoine Lisssajous quien diseñó un sistema óptico simple para estudiar vibraciones compuestas. De esta forma encontró patrones complejos formados cuando se superponen dos vibraciones armónicas a lo largo de líneas perpendiculares. Cuando el cociente de las frecuencias de las dos señales armónicas es racional, se obtienen trayectorias cerradas que dan lugar a movimientos periódicos, mientras que cuando el cociente de las frecuencias es irracional, las trayectorías son abiertas, obteniéndose un movimiento no periódico. En tal caso, al transcurrir el tiempo el sistema visita todos los puntos en un plano límitado por la amplitud de la señal, de manera que la curva llenará gradualmente todo el dominio. De hecho, en 1871, L. Boltzmann (1844-1906) hizo por primera vez la analogía entre las trayectorias físicas en un espacio bidimensional y las figuras de Lissajous, lo que parece ser la primera descripción de Boltzmann de la hipótesis ergódica



Figura 10: Trayectorias Lagrangianas de una partícula sujeta a dos fuerzas de Lorentz armónicas y ortogonales. Primera columna: observación experimental. Segunda columna: cálculo numérico. Primera fila: razón de frecuencias $\Omega=3$ y fase relativa $\phi = \frac{\pi}{2}$. Segunda fila: razón de frecuencias $\Omega = 3/2$ y fase relativa $\phi = 0$.

[16].

Mientras que las figuras de Lissajous se pueden entender desde un punto de vista puramente cinemático y no disipativo, las trayectorias Lagrangianas resultantes de la acción de dos fuerzas ortogonales se originan en un sistema disipativo no lineal, es decir, en un flujo viscoso forzado electromagnéticamente. En tanto que en el régimen lineal las trayectorias Lagrangianas reproducen las propiedades típicas de las figuras de Lissajous relacionadas con la periodicidad y no periodicidad del movimiento para cocientes de frecuencias racionales e irracionales, respectivamente, en el régimen ligeramente no lineal, es decir, cuando los efectos convectivos son pequeños, aún si la razón de frecuencias es racional, la partícula no regresa a su punto inicial. La figura 10 muestra la comparación de las trayectorias Lagrangianas obtenidas experimental y numéricamente de una partícula sujeta a dos fuerzas de Lorentz ortogonales que oscilan armónicamente, en el caso en que los efectos convectivos no son despreciables. Este hecho lleva a trayectorias Lagrangianas no cerradas.

Al incrementarse los efectos no lineales, las trayectorias Lagrangianas son cada vez



Figura 11: Secciones de Poincaré para distintos números de Reynolds (Re = 0.8, Re = 0.9, Re = 1 y Re = 1.4, respectivamente) obtenidas para 200 periodos a partir de las trayectorias de muchas partículas dentro de un flujo producido por dos fuerzas de Lorentz ortogonales periódicas. El cociente de las frecuencias de la fuerzas es $\Omega=1$ y la fase relativa $\phi = \frac{\pi}{2}$. Para todos los casos $R_{\omega} = 0.1$.

más complejas y describir su comportamiento se vuelve muy complicado, sobre todo para tiempos largos. Una manera alternativa conveniente para analizar la dinámica del sistema es calcular la sección de Poincaré [17]. Dicha sección es particularmente útil para el análisis de sistemas sujetos a fuerzas periódicas. De manera muy breve, podemos decir que la sección de Poincaré se calcula de la siguiente manera. Al tiempo inicial marcamos la posición de la partícula en el plano x - y, la dejamos evolucionar y volvemos a registrar su posición cuando el forzante ha completado un periodo, lo que se continua haciendo durante un determinado número de periodos. Así, la sección de Poincaré se forma mediante las intersecciones a cada periodo en el plano x - y de las órbitas seguidas por una o varias partículas. Si la trayectoria de una partícula es cerrada, la sección de Poincaré será un

punto, mientras que si no es cerrada, en principio los puntos podrían ir ocupando todo el espacio disponible. La figura 11 muestra las secciones de Poincaré correspondientes a muchas partículas en un flujo generado por dos fuerzas de Lorentz ortogonales periódicas, con un cociente de frecuencias racional igual a la unidad y desfasadas $\pi/2$. Puede observarse que en todas las secciones de Poicaré aparecen *islas*, es decir, regiones no visitadas por las partículas y que son indicativas de zonas dentro del dominio donde no ocurre un buen mezclado. Estas islas se presentan en muchos otros sistemas de mezclado. Este tipo de secciones de Poincaré parece indicar la presencia de un régimen de advección caótica.

6. La ecuación de advección-difusión: el método DSM

Veamos ahora la manera de tratar el mezclado a partir del enfoque Euleriano, es decir, resolviendo la ecuación de advección-difusión:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)c = \mathscr{D}\nabla^2 c.$$
(13)

Como se mencionó previamente, el objetivo es obtener el campo escalar de concentración de la sustacia como función de la posición y del tiempo, es decir, $c(\mathbf{x},t)$. Recordemos que el mecanismo advectivo, mediante el estiramiento y plegado, propicia la creación de filamentos de fluido que se alargan al transcurrir el tiempo, disminuyendo su grosor hasta alcanzar una cierta escala en donde la difusión entra en acción. Dicha escala se conoce como la escala de Batchelor y se define como la escala más pequeña que pueden alcanzar las fluctuaciones en la concentración escalar antes de que el fenómeno sea dominado por la difusión molecular [18]. Esta escala es similar a la escala de Kolmogorov que corresponde a la escala más pequeña que pueden alcanzar los vórtices o remolinos en un flujo turbulento antes de que domine la viscosidad. Cuando el número de Schmidt es mayor que la unidad (Sc > 1), lo que es común en muchos líquidos, la escala de Batchelor es más pequeña que la escala de Kolmogorov. Esto significa que el transporte escalar tiene lugar a escalas menores que el remolino más pequeño que sobrevive en un flujo turbulento antes de que el remolino más pequeño que sobrevive en un flujo turbulento antes de que el remolino más pequeño que sobrevive en un flujo turbulento antes de que el remolino más pequeño que sobrevive en un flujo turbulento antes de que el remolino más pequeño que sobrevive en un flujo turbulento antes de que sea disipado por viscosidad [18].

Si deseamos simular adecuadamente el proceso de advección-difusión, en principio la malla requerida para encontrar la solución numérica de la ecuación (13), dado un campo de velocidad \boldsymbol{u} , debe ser lo suficientemente fina para resolver al menos la escala de Batchelor. Para ejemplificar la situación, consideramos un problema bidimensional. Si suponemos que el grosor inicial del filamento es s_o , la escala de Batchelor es del orden de $s = s_o P e^{-1/2}$ [19]. Esto quiere decir que si consideramos un dominio cuadrado con L = 10 cm de lado y tomamos $s_o = 1$ cm, suponiendo que $Pe = 10^{10}$ (que es un valor común para flujo de líquidos), encontramos $s \approx 10^{-7}$ cm. Entonces una malla uniforme (dx = dy) capaz de resolver la escala de Batchelor debe cumplir

$$dx = \frac{L}{N} \approx s,$$

donde N es el número de nodos. Tomando en cuenta los valores anteriores, encontramos que $N \approx 10^6$, es decir, la malla numérica debe ser de al menos $N \times N \approx 10^{12}$, que es una malla extremadamente fina que considera apenas un dominio de 10 cm². Por tanto, en general, la solución numérica directa de la ecuación (13) es muy costosa computacionalmente ya que requiere mallas espaciales muy finas para resolver adecuadamente los gradientes de concentración.

Una alternativa para determinar la advección-difusión de un escalar en un campo de velocidad incompresible en dos dimensiones para números de Péclet grandes, es utilizar el método propuesto por Meunier & Villermaux [19], conocido como Diffusive Strip Method o bien DSM, que combina los enfoques Lagrangiano y Euleriano. Este es un método intermedio entre la resolución Euleriana de las ecuaciones en una malla, la cual comúnmente está limitada a números de Péclet pequeños, y la advección Lagrangiana de trazadores no difusivos, que corresponden a un número de Péclet infinito. Esencialmente, en este método el escalar se introduce como una tira material representada por un arreglo de trazadores pasivos Lagrangianos cuyas posiciones se calculan integrando las ecuaciones advectivas (4). Se elige entonces un nuevo sistema de referencia montado en la *i*-ésima partícula advectiva de la tira material, y haciendo un cambio de variables apropiado, la ecuación de advección-difusión se transforma en una simple ecuación de difusión en una dimensión, la cual tiene solución analítica para el campo de concentración. Escogiendo las coordenadas apropiadamente y suponiendo que el grosor de la tira difusiva es menor que su radio local de curvatura, el método DSM resuelve el problema asociado de advección difusión calculando la tasa local de estiramiento a lo largo de la tira. Así, el campo de concentración se reconstruye sumando pequeñas elipses Gaussianas, dadas por la solución analítica, centradas en cada trazador. La sucesión de elipses forma un filamento que representa la distribución escalar. Una explicación detallada del procedimiento numérico para la reconstrucción del campo escalar de concentración como función del tiempo, puede encontrarse en el artículo de Meunier & Villermaux [19].

La figura 12 muestra la comparación a distintos tiempos de la visualización experimental y la solución numérica del campo de concentración calculada con el método DSM para un flujo agitado electromagnéticamente utilizando un campo magnético dipolar [11, 20]. Podemos observar que cualitativamente la solución numérica reproduce razonablemente bien la evolución de la distribución experimental del trazador escalar. Nótese el engrosamiento de los filamentos que hace patente la tendencia a la homogeneización de la concentración la cual está ausente cuando se considera únicamente el seguimiento Lagrangiano. Debe mencionarse que también se ha efectuado una comparación cuantitativa


Figura 12: Vórtice dipolar oscilatorio porducido por una fuerza electromagnética que actúa en dirección vertical. En la parte superior se presenta la visualización experimental, mientras que en la parte inferior se muestran los resultados de la simulación numérica usando el método DSM. Primera columna, t=30 s, segunda columna, t=60 s, tercera columna, t= 90 s, cuarta columna, t= 150 s. El cuadrado denota la localización del imán permanente [20].

calculando la función de densidad de probabilidad [19] de los niveles de la concentración c, encontrando un acuerdo satisfactorio con el experimento [20].

7. Comentarios finales

En este escrito hemos presentado los mecanismos físicos básicos que intervienen en el mezclado escalar en régimen laminar, así como los conceptos y enfoques fundamentales utilizados para describirlo. A partir de los flujos generados por fuerzas electromagnéticas periódicas en capas delgadas de electrolito, se ilustraron los dos enfoques característicos del mezclado, a saber, el Lagrangiano y el Euleriano. Primero, usando los campos de velocidad calculados numéricamente con un modelo cuasi-bidimensional validado expe-

rimentalmente, se comparó el seguimiento Lagrangiano numérico de distintos flujos de vórices oscilatorios con la visualización experimental, encontrando un acuerdo razonable dado que este método no considera la difusión. Asimismo, se introdujeron las ideas básicas de la advección caótica y se presentó una manera de obtenerla en flujos agitados electromagnéticamente. Posteriormente, el transporte advectivo-difusivo de un escalar fue ilustrado implementando el método DSM, que resulta conveniente para números de Péclet grandes [19]. Este método numérico establece el vínculo entre los métodos de simulación estandar de la dinámica de fluidos limitados a bajos números de Péclet y los métodos de seguimiento Lagrangiano que no modelan la difusión escalar. Se ha encontrado que el método DSM captura correctamente las principales características físicas del mezclado escalar en flujos agitados electromagnéticamente.

Es importante enfatizar que en el trabajo presentado aquí se ha realizado un esfuerzo para validar los resultados de las simulaciones numéricas con las observaciones experimentales ya que, al igual que en cualquier rama de la física, este es un requisito indispensable para tener certeza de la validez de las herramientas teóricas utilizadas.

Agradecimiento. Este trabajo fue apoyado por CONACYT mediante el proyecto de Ciencia Básica 131399.

Referencias

- [1] Sturman, R., Ottino, J. M. y Wiggins, S. *The mathematical foundations of mixing*, Cambridge, 2006.
- [2] http://en.wikipedia.org/wiki/Mixing(processengineering)
- [3] Welander, P. Studies of the general development of motion in a two-dimensional, ideal fluid, *Tellus*, **7**, 265 (1955).
- [4] Ottino, J.M., The mixing of fluids, *Scientific American*, **260**, 5667 (1988).
- [5] Aref, H., The development of chaotic adevection, *Phys. Fluids*, **14**, 1315-1325 (2002).
- [6] Ottino, J. M., *The kinematics of mixing: stretching, chaos, and transport*, Cambridge, 1989.
- [7] Aref, H., Stirring by chaotic adevection, J. Fluid Mech., 14, 1315-1325 (1984).
- [8] Chien, W.L., Rising, H., and Ottino, J. M., Laminar mixing and chaotic mixing in several cavity flows, J. Fluid Mech. 170, 355 (1986).

- [9] de la Cruz, L. M. y Ramos, E. Mixing with time-dependent natural convection, *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, **33**, 191-198 (2006).
- [10] Figueroa, A., Demiaux, F., Cuevas, S., Ramos, E., Electrically driven vortices in a weak dipolar magnetic field in a shallow electrolytic layer, *J. Fluid Mech.*, 641, 245– 261 (2009).
- [11] Figueroa, A., Dinámica de vótices generados por fuerzas electromagnéticas, Tesis de Doctorado, Centro de Investigación en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México (2010).
- [12] Figueroa, A., Cuevas, S., Ramos, E., Electromagnetically driven oscillatory shallow layer flow, *Phys. Fluids*, **23**, 013601 (2011).
- [13] Voth, G. A, Saint, T. C., Dobler, G. and Gollubb, J. P. Phys. Fluids, 15, 2560-2566 (2003).
- [14] Guyon, E., Hulin, J. P., Petit, L., *Ce que disent les fluides*, Belin: Pour la Science, 2011.
- [15] Figueroa, A., Cuevas, S., Ramos, E., Lissajous Lagrangian trajectories in electromagnetically driven vortices. En preparación (2014).
- [16] Nolte, D. D., The tangled tale of phase space, *Phys. Today*, **63**(4), 33-44 (2010).
- [17] José, J. V., Saletan, E. J. Classical dynamics: A contemporary approach, Cambridge University Press, 1998.
- [18] Paul, E. L., Atiemo-Obeng, V. A., Kresta, S. M. Handbook of industrial mixing. Science and practice, Wiley, New York, 2004.
- [19] Meunier, P. and Villermaux, E. The Diffusive Strip Method for scalar mixing in two-dimensions, *J. Fluid Mech.* 662, 134-172 (2010).
- [20] Figueroa, A., Meunier, P., Cuevas, S., Villermaux, E. and Ramos, E., Chaotic advection at large Péclet number: electromagnetically diven experiments, numerical simulations and theoretical predictions. Phys. Fluids, 26, 013601 (2014).

Plasmas y Aplicaciones

O. Flores¹, F. Castillo¹, B. Campillo², H. Martínez¹

¹Laboratorio de Espectroscopia, Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional

Autónoma de México, Apartado Postal 48-3, 62191 Cuernavaca, Morelos, México.

hm@fis.unam.mx

²Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, México, D.F.

1. Introducción

En general el estado del plasma es el cuarto estado de la materia. Esto se debe a que si tomamos un gas constituido por átomos y moléculas (neutros) y le entregamos suficiente cantidad de energía, los átomos comienzan a ionizarse y aparecen en el gas partículas con carga eléctrica (iones y electrones). Cuando el número de partículas cargadas es suficientemente grande como para que el comportamiento dinámico del sistema quede determinado por fuerzas electromagnéticas de largo alcance y no por colisiones binarias entre partículas neutras (como en el caso de los gases ideales) se dice que el gas se ha convertido o transformado en un plasma. A diferencia de lo que ocurre con los otros estados de la materia, no existe una transición de fase entre el gas y el plasma sino que se produce una variación continua, aunque relativamente brusca en el grado de ionización No se puede definir un valor de temperatura constante en el cual el gas se transforma en un plasma.

Otra definición un poco más rigurosa con respecto al plasma podría ser la siguiente: un plasma es un gas cuasi-neutro de partículas cargadas y neutras que presentan un comportamiento colectivo y en el cual la energía potencial de una partícula típica de vida a la interacción con su vecino próximo es mucho menor que su energía cinética. En esta definición el término comportamiento colectivo se refiere a que las interacciones electromagnéticas (de largo alcance) determinan las propiedades estadísticas del sistema mientras que el término cuas-neutro significa que desde el punto de vista microscópico el número de cargas de uno y otro signo es aproximadamente igual.

El uso de la palabra plasma para referirse a este estado de la materia se debe a Langmuir y Tonks quienes lo utilizaron en 1929, durante sus estudios de oscilaciones en descargas eléctricas. En los plasmas de interés, para procesamiento de materiales pueden despreciarse generalmente los efectos cuánticos y relativistas. Debido a que la distancia media entre las partículas del plasma es mucho mayor que la longitud de DeBroglie y a que su velocidad es mucho menor que la velocidad de la luz.

Los plasmas de interés para procesamiento son formados y mantenidos por campos eléctricos alternos y continuos. En el caso de campos alternos las frecuencias típicas van desde los 100 KHz, en la zona de baja frecuencia, a 13,56 MHz en el rango de rf, y hasta 2,45 GHz en el rango de las microondas. El campo eléctrico acelera los electrones que, debido a su menor masa incrementan su energía cinética más rápidamente que los iones. La transferencia de energía de electrones a partículas pesadas (ion, átomo, molécula) vía colisiones elásticas es muy lenta debido a la gran diferencia de masa. En consecuencia, a baja presión (baja frecuencia de colisión) los electrones pueden acumular suficiente energía como para producir ionizaciones y excitación en las colisiones con partículas pesadas. De esta forma es posible generar especies muy reactivas (radicales, átomos libres) que

intervienen en reacciones químicas e interactúan con superficies. Esto explica el creciente uso de los plasmas en gran cantidad de procesos para generar nuevos materiales.

II.- Naturaleza del Plasma

Un plasma es un gas parcialmente ionizado que está compuesto de electrones, iones y átomos o moléculas neutras. Los electrones en el plasma se encuentran a una temperatura mucho más alta que las especies neutras, típicamente tienen temperaturas de alrededor de 10^4 K, aunque el plasma como un todo permanece casi a temperatura ambiente. La densidad electrónica del plasma es de alrededor de 10^{10} cm⁻³

III.- Formación del Plasma

Un campo eléctrico establecido sobre una región gaseosa, ya sea entre dos placas capacitivas o por inducción magnética. A una presión lo suficientemente baja, el efecto combinado de la aceleración de los electrones en el campo eléctrico y la dispersión elástica de los electrones con los átomos neutros o con las líneas de campo, inducen el calentamiento de los electrones. Cuando los electrones ganan una energía cinética superior a la energía de primera ionización en las especies neutras de gas, las colisiones electrón-especie neutra, inducen la formación de más electrones libres que a su vez son acelerados y por lo tanto calentados para formar el plasma.

IV.- Interacción Plasma-Superficie

La energía de los electrones e iones en el plasma es suficiente para ionizar los átomos y/o moléculas neutras presentes, disgregándolos para formar iones reactivos y calentar localmente la superficie. Dependiendo del gas y de los parámetros de operación, los plasmas son capaces de realizar trabajo mecánico a través de un proceso de ablación por la transferencia cinética de electrones e iones con la superficie. También es posible realizar trabajo químico a través de la interacción de las especies iónicas reactivas con la superficie. En general, los plasmas son capaces de interactuar y modificar la superficie de los materiales a través de varios mecanismos: ablación, activación, depositación, formación de enlaces cruzados (cross-linking) e implantación de iones (grafting).

IV.1.-Ablación:

La ablación por plasma permite la remoción mecánica de contaminantes superficiales mediante el bombardeo de iones y electrones de alta energía. Las películas superficiales contaminantes (aceites de corte, aceites protectores, polvos desmoldadores) están unidos típicamente por enlaces débiles C-H. La ablación rompe los enlaces covalentes débiles de los contaminantes poliméricos mediante el bombardeo mecánico. Los contaminantes superficiales experimentan cortes repetitivos de sus cadenas hasta que su peso molecular es lo suficientemente bajo para ser evaporado en las condiciones de vacío. La ablación solo afecta las películas contaminantes y las capas más superficiales del material del sustrato. El gas argón es el preferido para este proceso, pues tienen una mayor eficiencia de ablación y es químicamente inerte con la superficie de los materiales.

IV.2.-Activación:

La activación de una superficie por plasma requiere de la creación de grupos funcionales químicos sobre la superficie a través de plasma de gases como son: el oxígeno, hidrogeno, nitrógeno y amoníaco, los cuales se disocian y reaccionan con la superficie. En el caso de

los polímeros, la activación de la superficie implica la sustitución de grupos poliméricos superficiales por grupos químicos provenientes del plasma. El plasma rompe los enlaces débiles de la superficie del polímero y los reemplaza con grupos altamente reactivos como son: los carbonilos, carboxilos e hidroxilos. El proceso de activación altera la actividad química y las características de la superficie, modificando la humectabilidad y la adhesión generando superficies con una alta adhesión y por lo tanto una gran duración del adhesivo.

IV.3.- Enlazamiento cruzado (Cross-linking):

El enlazamiento cruzado (Cross-linking) en los polímeros se refiere al establecimiento de enlaces químicos entre las cadenas moleculares de los polímeros. El plasma con gases inertes puede ser empleado para generar enlaces cruzados en la superficie del polímero y producir una película superficial más dura y resistente que la matriz. Bajo ciertas circunstancias, el enlazamiento cruzado generado por plasma puede generar una mayor resistencia química y al desgaste de la superficie polimérica.

IV.4.- Depositación:

Durante el proceso de depositación por plasma se forma una película delgada de polímero sobre la superficie a través del proceso de polimerización en plasma. La película delgada depositada puede presentar varias propiedades o características físicas resultantes del gas específico empleado en el plasma así como de los parámetros empleados. Los recubrimientos pueden mostrar un alto grado de entrecruzamiento y una adherencia mucho más fuerte al sustrato en comparación con películas producidas por los métodos convencionales de polimerización.

IV.5.- Gases empleados en limpieza y modificación superficial por plasma: Aire

- Remoción de contaminantes (químico).
- Proceso de oxidación.
- Activación de Superficies.
- \boldsymbol{O}_2
- Remoción de contaminantes (químico).
- Proceso de oxidación.
- Activación de superficie (humectabilidad & adhesión).
- Ataque químico (orgánico).
- Depositación (óxidos metálicos).

Nota: debe emplearse una bomba de vacío especial para uso con oxígeno para evitar riesgos innecesarios y evitar los posibles daños.

- N_2
- Activación de superficie.
- Depositación (SiN (con Si), nitruros metálicos (con M)).

Ar

- Remoción de contaminantes (ablación).
- Enlazamientos cruzados (Crosslinking).
- H_2
 - Remoción de contaminantes (química).
 - Modificación superficial (curado).
 - Procesos de reducción (óxidos metálicos).

Depositación (metales (w/ M)).

Nota: Debe tomarse extrema precaución cuando se trabaja con H_2 como gas de plasma para evitar posibles riesgos y daños.

Mezclas

- Simulación de atmosferas.
- Modificación superficial (nitruración iónica, oxidación).
- Procesos de reducción (óxidos metálicos).
- Depositación (compuestos cerámicos, carburos, nitruros, etc.).

IV.6.- Ventajas Generales del Plasma

Interacción con la Superficie

El tratamiento con plasma solo afecta la región cercana a la superficie del material tratado; por lo que no modifica las propiedades de la matriz del material tratado. El proceso de limpieza superficial con plasma no deja residuos orgánicos sobre la superficie, como sucede con muchos procesos húmedos de limpieza, bajo condiciones adecuadas puede realizarse una completa remoción de los contaminantes superficiales, generando una superficie atómicamente limpia. El plasma no tiene limitaciones debidas a efectos de tensión superficial, como las de las soluciones acuosas, por lo que puede limpiar superficies rugosas, porosas o irregulares. El tratamiento con plasma ocurre a temperaturas cercanas a la temperatura ambiental, minimizando el riesgo de dañar materiales sensibles al incremento de la temperatura.

Flexibilidad y consistencia del proceso con plasma

Dependiendo de los parámetros de operación durante el tratamiento con plasma, el proceso puede emplearse para realizar limpieza, activación, esterilización y alteración de las características superficiales de los materiales tratados. El plasma es capaz de reaccionar con una gran variedad de materiales, no solo eso, también es posible el tratamiento de dispositivos ensamblados de diferentes materiales. Es posible realizar la limpieza con plasma de partes irregulares de geometrías difíciles de limpiar mediante otras técnicas. El proceso es altamente reproducible, caracterizándose por una gran consistencia del resultado, mayor a los procesos químicos y mecánicos.

Bajo costo - Facilidad de empleo

El proceso con plasma es altamente eficiente con tiempos de tratamiento cortos, sin etapas de secado y consumos pequeños de energía. También reduce o incluso evita procesos adicionales de corrección de las superficies por daño térmico o por solventes. Es más fácil de usar y mantener comparado con los procesos químicos y mecánicos, además, no requiere de sistemas complicados de análisis químico o de mantenimiento. El empleo de plasma frecuentemente elimina la necesidad de solventes, junto con los costos de adquisición y disposición de los mismos.

Usos y Seguridad ambiental

El empleo de plasma elimina los riesgos de seguridad asociados a la exposición de operarios a químicos peligrosos. El plasma es contenido en una cámara de reacción en condiciones de vacío, con muy poca o nula exposición del trabajador. Las temperaturas de

operación están cercanas a la temperatura ambiental con casi nulo riesgo de exposición a altas temperaturas. El tratamiento con plasma no0 emplea reactivos peligrosos, como son: fluorocarbonos clorinados, solventes orgánicos, químicos de limpieza ácidos. La EPA (Agencia de Protección del Ambiente, por sus siglas en inglés) ha clasificado la mayoría de los procesos con plasma como procesos verdes y amigables con el medio ambiente

V.- APLICACIONES DEL PLASMA

El proceso de plasma puede ser empleado en una gran variedad de aplicaciones, los cuales incluyen los campos de la ciencia e ingeniería de materiales (polímeros, materiales biomédicos), microfluidos, óptica, microscopia e investigación dental y médica.

V.1.- Limpieza con plasma

La limpieza de superficies con plasma beneficia la preparación de la superficie previa al pegado y en otras aplicaciones.

Beneficios de la limpieza con plasma

- Remoción de contaminantes orgánicos por reacción química (plasma de O₂ o aire) o
 por ablación física (plasma de argón). Limpieza de substratos para reducir la
 autofluorescencia de fondo de contaminantes orgánicos en microscopia de
 fluorescencia.
- Elimina el empleo de solventes químicos así como el almacenamiento y disposición de residuos de los solventes empleados.
- Limpia superficies con microporosidad o con microcanales, superficies no susceptibles de limpiarse con solventes líquidos debido a las limitaciones impuestas por la tensión superficial.
- Hace hidrofilias a la mayoría de las superficies; disminuye el ángulo de contacto e incrementa la humectabilidad de las superficies.
- Promueve la adhesión e incrementa la fuerza de enlace entre las superficies.
- Prepara las superficies para tratamientos posteriores o constituye una etapa final de tratamiento (ej. depositación de películas delgadas o adsorción de moléculas).
- Esteriliza y remueve contaminantes microbianos de superficies; por lo cual encuentra aplicaciones en biomedicina y en biomateriales.
- Limpia las superficies sin alterar las propiedades de la matriz.
- Puede tratarse una gran variedad de materiales con geometrías complejas, por ejemplo:
 - Wafers (placas) de semiconductor sus substratos (Si, Ge).
 - Películas de vidrio y sus substratos.
 - Limpieza de dispositivos ópticos y fibras ópticas (cuarzo, Ge, ZnSe), portamuestras y substratos para mediciones espectroscópicas (ATR-FTIR, UV-Vis, SERS)
 - Óxidos (cuarzo, oxido de estaño indio (indium tin oxide, ITO), TiO2, Al2O3); mica. Limpieza de cristales de cuarzo para mediciones en microbalanza (QCM)
 - Oro y superficies metálicas para experimentos de autoensamblado.
 - o Rejillas para microscopia electrónica (EM)

• Puntas de cantiléver para microscopia de fuerza atómica para medir morfología y coeficientes de fricción.



Angulo de contacto de una gota de agua sobre superficie de vidrio de borosilicato en tres diferentes condiciones. (a) recubrimiento de cera de halocarbon (92°), (b) sin tratamiento $(32 \pm 2^{\circ})$ y (c) limpiada con un plasma de Ar (<10°). Fuente: Sumner, A. L., E. J. Menke, Y. Dubowski, J. T. Newberg, R. M. Penner, J. C. Hemminger, L. M. Wingen, T. Brauers, B. J. Finlayson-Pitts. "The Nature of Water on Surfaces of Laboratory Systems and Implications for Heterogeneous Chemistry in the Troposphere." Phys. Chem. Chem. Phys. (2004) 6: 604-613.

Comentarios sobre el proceso:

- Plasma de O₂ o aire:
 - Remueve los contaminantes orgánicos por reacción química con los radicales de oxigeno, altamente reactivos y por ablación debido a los iones energetios de oxigeno.
 - Promueve la hidroxilación (adhesión de grupos OH) sobre la superficie.
 - Oxida la superficie; esta puede ser indeseable para algunos materiales (Au y Ag) y puede afectar sus propiedades superficiales.
- Plasma de Ar:
 - Limpia las superficies por bombardeo físico de iones de Ar y por ablación de los contaminantes superficiales.
 - No reacciona con la superficie, no la altera químicamente.
- Para aplicaciones que son sensitivas a la contaminación potencial de elementos traza (ej. Ca, K, Na) presentes en los borosilicatos, se recomienda el empleo de una cámara de cuarzo en vez de la cámara estándar de vidrio pyrex.
- Pueden sugerirse condiciones experimentales para cada proceso, pero siempre se requiere experimentación para determinar los mejores parámetros de operación para cada caso específico.
 - o Presión: 100 mTorr a 1 Torr
 - Potencia de Radio Frecuencia: Media a Alta.

- Tiempo de proceso: 1-3 minutes, a menor potencia se requiere mayor tiempo de tratamiento.
- Potencias bajas se emplean para minimizar el daño mecánico de la superficie, como en proceso de preparación de muestras para microscopia electrónica de transmisión.

VI.-. Nitruración con plasma.

La nitruración mediante plasma, también conocida como nitruración iónica, es un proceso esencialmente difusivo que mejora la resistencia a la fatiga y al desgaste de componentes o piezas sujetas a este proceso. El proceso de nitruración por plasma es un proceso térmico que se realiza en vacio. El ciclo del proceso se inicia colocando la pieza dentro de un reactor, este se evacua hasta una cierta presión de vacío, una vez que se alcanza el vacío predeterminado, se hace pasar un flujo de gas de proceso para que se inicie el ciclo de precalentamiento. Los ciclos estándares de precalentamiento se encuentran en un rango de temperaturas entre 460 a 580 °C. Una vez que el tiempo de precalentamiento seleccionado concluye, la pieza es sujeta a un bombardeo iónico para limpiar las impurezas de la superficie. Posteriormente, el gas de proceso seleccionado se ioniza a través de un voltaje que se aplica a la pieza. Este gas ionizado colisiona con la pieza provocando la remoción de impurezas de la superficie y a su vez prepara la pieza para que el proceso de nitruración pueda iniciar. Una vez que la superficie de la pieza se ha limpiado lo suficiente el ciclo de nitruración se inicia. Un flujo controlado de nitrógeno-hidrógeno, en ocasiones también se usa metano, se introducen en el reactor, y se ioniza por el voltaje aplicado a la pieza. El plasma generado por la ionización envuelve la superficie de la pieza con una descarga luminiscente de color azul-violáceo. La combinación de calor y energía del plasma provoca que los gases reaccionen con los elementos formadores de nitruros del material (pieza de acero), por lo que a medida que el gas de proceso reacciona con los elementos del acero, una capa resistente al desgaste se forma. Esta capa puede consistir de nitruros compuestos de γ' - Fe₄N o de ϵ -Fe₂₋₃N, dependiendo del porcentaje de cada gas en el reactor. El que se seleccione una composición en particular, dependerá del uso y aplicación de la pieza, ya en servicio. En suma para aumentar la resistencia a la abrasión del acero, la capa nitrurada también mejora su resistencia a la fatiga y reduce su coeficiente de fricción. El ciclo de nitruración es continuo durante 2 a 72 horas hasta alcanzar la profundidad de capa deseada de aproximadamente de 50 a 600 µm. El tiempo del proceso es dependiente de la composición química del acero (pieza) a ser niturado y de la profundidad de capa requerida. Por lo general los aceros de baja aleación se procesan mediante ciclos de tiempo largos.

VI.1.- Características microestructurales de los materiales nitrurados vía plasma

Después de la nitruración iónica las capas superficiales tienen esencialmente la misma estructura microscópica que las superficies nitruradas convencionalmente. Sin embargo, hay diferencias considerables con respecto a detalles microscópicos.

La figura siguiente muestra la microestructura de un acero nitrurado iónicamente. La capa mas externa, es muy delgada y consiste principalmente en nitruros de hierro, no es atacada por ácido nítrico alcohólico que se presenta de color blanco en la micrografía. Por esta razón, la capa es usualmente llamada capa blanca. Debajo de la capa compuesta esta la llamada zona de difusión donde el nitrógeno se ha incorporado principalmente dentro de los enlaces de hierro existentes como átomos intersticiales o como precipitados finamente dispersos de la aleación. El espesor de la zona de difusión depende de la temperatura, tiempo del tratamiento y contenido de aleantes del acero.



En contraste con el proceso convencional de nitruración, donde prácticamente solo el espesor de estas dos zonas puede ser variarse dentro de los límites cercanos, la nitruración iónica ofrece la posibilidad de afectar en gran parte, la estructura vitespesor en planción de parámetros ajustables del proceso. La alteración de tales parámetros como voltaje, corriente, presión de gas, composición del gas, temperatura, etc, tiene una influencia directa en el fenómeno físico fundamental de la nitruración iónica. Las diferentes estructuras de las capas superficiales de nitruración iónica son usualmente alcanzadas empleando medianas velocidades de bombardeo, controladas por la variación del voltaje, presión y composición de la mezcla de gases.

VI.2.- Formación de la zona de difusión.

Las condiciones para la formación de la zona de difusión pueden ser consideradas de manera similar a aquellas que fueron llevadas a cabo tomando en cuenta la creación optima de la capa compuesta. Es reconocido que el grado de endurecimiento superficial y el grado de fragilidad son de mayor importancia con respecto a casi todos los esfuerzos mecánicos que la pieza tendrá que resistir. Los dos requerimientos esenciales que pueden ser llenados por nitruración son: un endurecimiento optimo de la zona de difusión por precipitación de los nitruros de aleantes durante la nitruración, o nitruros de hierro mediante el envejecimiento después de la nitruración, y la muy pequeña posible pérdida de ductilidad mediante la prevención del fenómeno de fragilización.

El gran numero de variables del proceso de nitruración iónica hacen posible el cumplir estos dos requerimientos adaptando el proceso en una manera casi ideal al material que es tratado y a los esfuerzos que el material tendrá que resistir. Un buen endurecimiento superficial de los aceros aleados es obtenido mediante una muy intensiva precipitación finamente dispersa de nitruros de aleantes. Si los enlaces de Fe contienen suficientes elementos de aleación disueltos capaces de dar aparición a estos nitruros, tales como aluminio, Cr, Mo, V, etc, su precipitación es principalmente gobernada por el suministro de nitrógeno y por la temperatura de nitruración. En la nitruración iónica, el contenido de nitrógeno en los enlaces de Fe cerca de la superficie es muy alto debido a la condensación de FeN en la superficie y a la difusión en gran proporción de nitrógeno transcristalino. Además, este contenido de nitrógeno puede ser influenciado por la variación de composición del gas de tratamiento.

La temperatura de tratamiento es de importancia teniendo en cuenta la solubilidad del nitrógeno en el hierro alfa y debería colocarse al valor más alto posible. De a acuerdo a esto, la temperatura óptima del proceso para aceros al carbono está entre 550 y 580°C.

Como la intensidad y la cinética de precipitación de nitruros también depende en gran extensión de la temperatura, un máximo endurecimiento durante la nitruración iónica de los aceros al carbono es solo obtenido a ciertas temperaturas. De acuerdo a esto, la temperatura de nitruración iónica de tales aceros en la mayoría de los casos tiene que colocarse a un valor entre 400 y 500°C dependiendo del grado del acero y del grado deseado de endurecimiento.

VI.3.- Características especiales de la nitruración iónica

- a) Es un proceso que se puede aplicar a bajas temperaturas, desde 350°C, con calentamiento y enfriamiento a velocidad controlada en vacío, lo cual reduce al mínimo o elimina las distorsiones y cambios dimensionales; permitiendo obtener muy buenos valores de dureza, resistencia a la fatiga y corrosión.
- b) La nitruración iónica se puede aplicar en forma selectiva o parcial en una misma pieza usando máscaras metálicas que pueden ser reutilizadas.
- c) El control preciso y automático de las variables: temperatura, tiempo, presión, composición química del plasma, y potencial de aceleración de los iones permite ajustar el proceso para cada material y aplicación. Debido a estas características es posible controlar la metalurgia física de la superficie y obtener las capas blancas y de difusión, de espesor y estructuras adecuadas.
- d) Por las características mencionadas (únicas de la nitruración iónica) esta es la tecnología mas adecuada para tratar piezas de precisión como lo son matrices, engranajes, herramientas especiales, cigüeñales, brochas, mandriles, rodillos de laminación, etc., además de que las piezas después del tratamiento quedan listas para ser puestas en servicio.

VI.4.- Ventajas del proceso:

-Genera una superficie resistente al desgaste sin que produzca capas frágiles que se desprendan, esto permite eliminar los costos de operación de remoción de la capa blanca asociada con la nitruración a gas tradicional.

- La capa dura y resistente al desgaste es una capa esencialmente difusiva, y esto hace que los problemas de desprendimiento, rupturas, crecimiento por efecto de esquinas, etc. no existan, como lo que aparecen durante procesos como recubrimientos electrolíticos como Cromado duro. También abate los costos debido a que al recuperar piezas no sea necesario remover películas o depósitos, sino que se puede realizar nuevamente una nitruración.

-La resistencia a la fatiga de los materiales es mejorada, situación que no logra alcanzarse con otros procesos de depositación, como los electroplateados.

-Produce una descarga luminiscente que envuelve completamente a la superficie, produciendo una dureza consistente así como una profundidad de capa uniforme, esto es muy importante pues en piezas con geometrías complejas otros procesos no permiten que estas capas se formen en forma homogénea, como lo sería con los procesos tradicionales a gas.

-Este proceso permite que la superficie logre una dureza superficial elevada y a su vez que no se modifiquen las propiedades en el centro de las piezas, esto debido a las temperaturas de proceso.

-Este proceso permite que se puedan tratar una gran variedad de aceros tales como: fundiciones grises, aceros estructurales, aceros para moldes, aceros para herramientas y aceros inoxidables.

-Es un proceso que no contamina, pues utiliza gases no-tóxicos, a comparación de los procesos tradicionales a gas y de sales fundidas que utilizan gases tóxicos, sales, etc que son difíciles de controlar y dañinos para los operadores y al ambiente.

- La capa dura y resistente al desgaste es una capa esencialmente difusiva, y esto hace que los problemas de desprendimiento, rupturas, crecimiento por efecto de esquinas, etc. no existan, como lo que aparecen durante procesos como recubrimientos electrolíticos como Cromado duro. También abate los costos debido a que al recuperar piezas no sea necesario remover películas o depósitos, sino que se puede realizar nuevamente una nitruración.

-La resistencia a la fatiga de los materiales es mejorada, situación que no logra alcanzarse con otros procesos de depositación, como los electroplateados.

VII.- Fusión nuclear

La fusión nuclear es una reacción nuclear en la que dos núcleos de átomos ligeros, en general el hidrógeno y sus isótopos (deuterio y tritio), se unen para formar otro núcleo más pesado, liberando una gran cantidad de energía.

Un ejemplo claro lo vemos a diario en la energía del sol que tiene su origen en la fusión de núcleos de hidrógeno, generándose helio y liberándose una gran cantidad de energía que llega a la Tierra en forma de radiación electromagnética.



Para efectuar las reacciones de fusión nuclear, se deben cumplir los siguientes requisitos:

- Temperatura muy elevada para separar los electrones del núcleo y que éste se aproxime a otro venciendo las fuerzas de repulsión electrostáticas. La masa gaseosa compuesta por electrones libres y átomos altamente ionizados se denomina PLASMA.
- Confinamiento necesario para mantener el plasma a elevada temperatura durante un tiempo mínimo.
- Densidad del plasma suficiente para que los núcleos estén cerca unos de otros y puedan lugar a reacciones de fusión.

Los confinamientos convencionales, como las paredes de una vasija, no son factibles debido a las altas temperaturas del plasma. Por este motivo, se encuentran en desarrollo dos métodos de confinamiento:

- Fusión nuclear por confinamiento inercial (FCI): Consiste en crear un medio tan denso que las partículas no tengan casi ninguna posibilidad de escapar sin chocar entre sí. Una pequeña esfera compuesta por deuterio y tritio es impactada por un haz de láser, provocándose su implosión. Así, se hace cientos de veces más densa y explosiona bajo los efectos de la reacción de fusión nuclear.
- Fusión nuclear por confinamiento magnético (FCM): Las partículas eléctricamente cargadas del plasma son atrapadas en un espacio reducido por la acción de un campo magnético. El dispositivo más desarrollado tiene forma toroidal y se denomina TOKAMAK.

VII.1.-Aspectos generales de la fusión nuclear

La fusión nuclear tiene lugar cuando dos núcleos de átomos ligeros se unen para formar otro núcleo más pesado, liberando una gran cantidad de energía.

Los elementos atómicos empleados normalmente en las reacciones fusión nuclear son el Hidrógeno y sus isótopos: el Deuterio (D) y el Tritio (T). Las reacciones de fusión más importantes son:

D + T --> 4He + n + 17,6 MeV D + D --> 3He + n + 3,2 MeV D + D --> T + p + 4,03 MeV

n = neutrones p = protones

Para que tengan lugar estas reacciones debe suministrarse a los núcleos la energía cinética necesaria para que se aproximen los núcleos reaccionantes, venciendo así las fuerzas de repulsión electrostáticas. Para ello se necesita calentar el gas hasta temperaturas muy elevadas (10^7 ó 10^8 °C), como las que se supone que tienen lugar en el centro de las estrellas.

El gas sobrecalentado a tan elevadas temperaturas, de modo que los átomos estarán altamente ionizados, recibe el nombre de plasma.

El requisito de cualquier reactor de fusión nuclear es confinar dicho plasma con la temperatura y densidad lo bastante elevadas y durante el tiempo justo, a fin de permitir que

ocurran suficientes reacciones de fusión nuclear, evitando que escapen las partículas, para obtener una ganancia neta de energía. Esta ganancia energética depende de que la energía necesaria para calentar y confinar el plasma, sea menor que la energía liberada por las reacciones de fusión nuclear. En principio, por cada miligramo de deuterio-tritio se pueden obtener 335 MJ.

VII.2.- Combustible utilizado para las reacciones de fusión nuclear

Es bien sabido que las tres cuartas parte del Planeta están cubiertas por agua, cuyas moléculas están formadas por dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno.

El Deuterio es un isótopo estable del hidrógeno formado por un <u>protón</u> y un <u>neutrón</u>. Su abundancia en el agua es de un <u>átomo</u> por cada 6.500 <u>átomos</u> de Hidrógeno, lo que significa que con el contenido de deuterio existente en el agua del mar (34 gramos por metro cúbico) es posible obtener una energía inagotable mediante la fusión nuclear, y cuyo contenido energético es tal que con la cantidad de deuterio existente en cada litro de agua de mar, la energía obtenida por la fusión nuclear de estos <u>átomo</u>s de deuterio equivale a 250 litros de petróleo.



El otro elemento empleado en la fusión nuclear es el Tritio, es el <u>isótopo</u> inestable o radiactivo del <u>átomo</u> de hidrógeno. Está compuesto por un <u>protón</u> y dos neutrones y se desintegra por emisión beta con relativa rapidez, y aunque es escaso en la naturaleza, puede ser generado por reacciones de captura <u>neutrón</u>ica con los <u>isótopo</u>s del Litio, material abundante en la corteza terrestre y en el agua del mar.

VII.3.- Confinamiento

Los confinamientos convencionales no son posibles debido a las altas temperaturas del plasma que deben soportar. Por este motivo, se han desarrollado dos importantes métodos de confinamiento:

Fusión nuclear por confinamiento inercial (FCI): Tecnología para producir la fusión termonuclear aprovechando la inercia mecánica de pequeñas esferas sólidas y densas de Deuterio-Tritio para calentarlas hasta la temperatura de fusión mediante la inyección de breves e intensos pulsos de energía (radiación láser o partículas muy energéticas

procedentes de un acelerador). El bombardeo de estas esferas provoca su calentamiento y la posterior compresión de su superficie a una altísima temperatura, formando un plasma caliente. El plasma se escapará libremente hacia fuera, pero por conservación del impulso, parte de las partículas tendrá que ir hacia dentro. Esa implosión será capaz de comprimir la mezcla de gas Deuterio-Tritio que puede colocarse dentro de la esfera, y juntamente con el calor producido provocar una fusión termonuclear. En este proceso, las fases de calentamiento y confinamiento se efectúan al mismo tiempo, usando el mismo dispositivo suministrador de la energía.

Fusión nuclear por confinamiento magnético (FCM): Tecnología para provocar la fusión manteniendo el plasma de Deuterio-Tritio confinado mediante un campo magnético de la configuración e intensidad adecuadas. Con el uso de los campos electromagnéticos se consigue que las partículas del plasma se aceleren, evitando que sigan caminos aleatorios y puedan reaccionar con más facilidad. Las fases de calentamiento y confinamiento se hacen por separado. El confinamiento magnético más simple es un campo magnético uniforme, donde las partículas realizarán trayectorias espirales alrededor de la dirección del campo Esto sería suficiente para confinar las partículas en sólo dos direcciones. Para evitar la pérdida de las partículas a lo largo del eje del campo hay dos posibles opciones: Se puede construir un toro –configuración cerrada– o se puede crear en los extremos una zona de alta densidad de líneas de campo magnético que reflejaría las partículas dentro de la región donde el campo es inferior. Serían los espejos magnéticos.

El inmenso potencial energético de la fusión nuclear incentiva el continuo desarrollo tecnológico en ambos tipos de confinamiento. Con el Deuterio existente en todo el Planeta se podrían obtener 1021 kW/año, lo cual podría dar energía durante aproximadamente 1011 años, considerando la poca cantidad que se necesita por reacción de fusión.

VII.4.- Evolución histórica y proyectos futuros sobre la fusión nuclear

•

Los orígenes de la fusión nuclear se localizan hacia 1929 cuando Atkinson y Houtemans plantearon la posibilidad de obtener energía de las reacciones de fusión. Sin embargo, los conceptos más importantes de fusión nuclear y su aplicación real, se desarrollaron a partir de 1942 con los trabajos de H. Bethe, E. Fermi, R. Oppenheimer y E. Teller, entre otros. A través del proyecto Sherwood se llevaron a cabo los primeros avances tecnológicos, que permitieron desarrollar el concepto de confinamiento magnético, obteniéndose los primeros diseños: z-pinch, stellarator y espejos magnéticos.

En 1961, J. Nuckolls (EEUU) y N. Basov (URSS) desarrollaron una técnica mediante la cual se podrían obtener reacciones de fusión nuclear mediante altas compresiones provocadas por la cesión de energía. Se desarrollaron así programas secretos en EEUU y Rusia. Posteriormente, Francia se une a este desarrollo, también secreto. Otros países como Alemania, Japón, Italia y EEUU (Rochester) desarrollaron programas abiertos. En 1965, Artsimovich presentó los resultados de sus investigaciones, en la "2ª Conferencia de Plasma y Fusión Controlada", sobre el concepto TOKAMAK (Toroidal KAmera MAgnetiK).

En el concepto TOKAMAK, el campo magnético necesario para confinar el plasma es el resultado de la combinación de un campo toroidal, de un campo poloidal, ambos creados por bobinas toroidales, y de un campo vertical (creado por un transformador). El plasma

actúa como secundario de un transformador por donde se induce corriente que lo calienta. Por el primario del transformador circula una intensidad de corriente variable.

En 1968, el Premio Nobel N. Basov, informó de la obtención de temperaturas de ignición y de la producción de neutrones en las reacciones de fusión nuclear empleando láseres. A partir de entonces, se pudo disponer de una gran cantidad de aparatos en construcción y operación bajo el concepto TOKAMAK como los siguientes: TFR (Francia), T-4 y T-11 (URSS), ALCATOR y ORMAK (EEUU). Otros como el T-10 (URSS), PLT (EEUU), DITE (GB), ASEDX (RFA) y FRASCATI (EURATOM-Italia) comenzaron a construirse.

En la década de los 70 comenzó a producirse la primera serie de publicaciones sobre FCI (Fusión nuclear por Confinamiento Inercial). En EEUU, los principales investigadores fueron Brueckner, Nuckolls, Kidder y Clark. En Rusia, Basov y su equipo consiguieron el experimento más avanzado, alcanzándose cerca de 3 millones de neutrones en la implosión de esferas de CD2.

Basados en este concepto existen y han existido multitud de instalaciones con láser que han permitido avanzadas investigaciones sobre la fusión nuclear. De ellas se pueden destacar: NOVA (40 kJ, EUUU), OMEGA (30 kJ), GEKKO-XII (10 kJ, Japón), PHEBUS (3 kJ, Francia), VOLCAN (UK), ISKRA-5 (Rusia).

A partir de estas instalaciones de láser se han desarrollado dos grandes proyectos para demostrar altas ganancias: National Ignition Facility (NIF) en EEUU y Laser Megajoule (LMJ) en Francia.

Pero el láser no es el único dispositivo capaz de producir implosiones, también se observa que electrones y haces de iones ligeros y pesados son serios candidatos a la fusión nuclear por confinamiento inercial. Nacen así los siguientes proyectos con iones ligeros: ANGARA y PROTO (Rusia), PBFA-I y PBFA-II (EEUU).

En relación con los iones pesados, al no existir experimentos no se han podido alcanzar resultados exactos, aunque se han realizado ciertas predicciones mediante simulaciones teóricas como las realizadas en el Proyecto HIDIF (Heavy Ion Design of Ignition Facility) patrocinado por varios laboratorios e institutos europeos y por el Lawrence Berkeley Laboratory americano.

En la década de los 90, las instalaciones de tipo TOKAMAK: JET (EURATOM), TFTR (EEUU) y JT-60 (Japón), permitieron obtener cierta potencia. El primero fue el JET, que con una mezcla de D (90%) y T (10%) consiguió en 1991, una potencia de 1,7 MW. Posteriormente, en 1993, el TFTR con una mezcla de DT al 50% llegó hasta los 6 MW, alcanzándose temperaturas de 30 keV. En el calentamiento se gastaron 29 MW. En la actualidad, el TFTR está clausurado. Hasta la fecha, se han llegado a producir hasta 12 MW de potencia en reacciones de fusión nuclear controladas durante más de un segundo (JET, 1997) y existe la confianza de que con los avances tecnológicos actuales sea posible llegar al rango comercial de cientos de MW de forma mantenida.

La investigación experimental en FCM (Fusión nuclear por Confinamiento Magnético) en España ha estado concentrada en el CIEMAT (Centro de Investigaciones Energéticas,

Medioambientales y Tecnológicas), remontándose a 1983, año en el que se pone en funcionamiento la primera máquina de fusión nuclear, el Tokamak TJ-I.

Desde este instante, la investigación ha progresado de manera constante, y así, en 1994 se puso en marcha el primer dispositivo de fusión nuclear construido totalmente en España: el Stellerator TJ-I upgrade, que fue cedido en 1999 a la Universidad de Kiel al entrar en operación el TJ-II.

El TJ-II supuso un gran salto científico con respecto a los experimentos anteriores considerándose uno de los tres stellerators más avanzados del mundo junto con el alemán Wendelstein 7-AS del Instituto Max Planck en Munich y el japonés LHD de la Universidad de Nagoya.

VII.5.- El proyecto de fusión nuclear por confinamiento magnético: el ITER

El proyecto más avanzado en Fusión nuclear por Confinamiento Magnético <u>es el ITER</u> (International Thermonuclear Experimental Reactor), prototipo basado en el concepto Tokamak, y en el que se espera alcanzar la ignición. Ante los buenos resultados obtenidos en el JET, en 1990 se decidió continuar el programa de fusión con una instalación mayor en la que además del reactor, pudieran probarse sus sistemas auxiliares sin generar aún electricidad. En este proyecto participan la Unión Europea, Canadá, EEUU, Japón y Rusia.



El objetivo es determinar la viabilidad técnica y económica de la fusión nuclear por confinamiento magnético para la generación de energía eléctrica, como fase previa a la construcción de una instalación de demostración comercial.

ITER es un proyecto tecnológico cuya construcción se estima necesitará 10 años y al menos 20 de investigación. Entre las tecnologías empleadas para su construcción y posterior funcionamiento y mantenimiento destacan la robótica, superconductividad, microondas, aceleradores y los sistemas de control.

En la máquina ITER no se producirá energía eléctrica, se probaran las soluciones a los problemas que necesitan ser resueltos para hacer viables los futuros reactores de fusión nuclear. Este ambicioso proyecto de investigación dará sus primeros resultados a partir de 2050.

Las inversiones realizadas para su construcción se estiman en cerca de 5.000 millones de euros. Los costes de funcionamiento alcanzarán los 5.300 millones de euros y los de desmantelamiento ascienden a 430 millones de euros. El país donde se instale deberá correr con los costes de preparación del terreno y de construcción del edificio.

VII.6.- Ventajas de la fusión nuclear

Entre las ventajas de este dispositivo pueden citarse las siguientes:

- La fusión nuclear es una energía limpia ya que no produce gases nocivos y genera residuos nucleares de muy baja actividad.
- Un reactor de fusión nuclear es intrínsecamente seguro ya que la propia reacción se detiene al cortar el suministro de combustible. No depende de ningún sistema externo de seguridad susceptible de errores.
- Es una fuente inagotable de energía ya que el Deuterio existe en abundancia en la naturaleza y el Tritio es generado dentro del propio reactor a partir del Deuterio.

VIII.- Agradecimientos.

Se agradece el apoyo técnico del Ing. H. H. Hinojosa y al Q. Ivan Puente, así como el apoyo financiero de los proyectos DGAPA IN-101613 y CONACyT 128714.

Referencias

H. Lee, B. Vahidi, C. Tu, D. Cribbs, N. L. Jeon, C. Cotman. "Fabrication of a Microfluidic Device for the Compartmentalization of Neuron Soma and Axons." (08/22/2007). Journal of Visualized Experiments, 7,

Bhattacharya, S., A. Datta, J. M. Berg, S. Gangopadhyay. "Studies on surface wettability of poly(dimethyl) siloxane (PDMS) and glass under oxygen-plasma treatment and correlation with bond strength." J. Microelectrom. S. (2005) 14(3): 590-597.

Hillborg, H., J. F. Ankner, U. W. Gedde, G. D. Smith, H. K. Yasuda, K. Wikström. "Crosslinked polydimethylsiloxane exposed to oxygen plasma studied by neutron reflectometry and other surface specific techniques." Polymer (2000) 41: 6851-6863.

Duffy, D. C., J. C. McDonald, O. J. A. Schueller, G. M. Whitesides. "Rapid Prototyping of Microfluidic Systems in Poly(dimethylsiloxane)." Anal. Chem. (1998) 70: 4974-4984.

Jiang, X., H. Zheng, S. Gourdin, P. T. Hammond. "Polymer-on-Polymer Stamping: Universal Approaches to Chemically Patterned Surfaces." Langmuir (2002) 18: 2607-2615.

Zheng, H., M. F. Rubner, P. T. Hammond. "Particle Assembly on Patterned "Plus/Minus" Polyelectrolyte Surfaces Via Polymer-On-Polymer Stamping." Langmuir (2002) 18: 4505-4510.

Ma, Z., W. He, T. Yong, S. Ramakrishna. "Grafting of Gelatin on Electrospun Poly(caprolactone) Nanofibers to Improve Endothelial Cell Spreading and Proliferation and to Control Cell Orientation." Tissue Eng. (2005) 11: 1149-1158.

Ha, S.-W., M. Kirch, F. Birchler, K.-L. Eckert, J. Mayer, E. Wintermantel, C. Sittig, I. Pfund-Klingenfuss, M. Textor, N. D. Spencer, M. Guecheva, H. Vonmont. "Surface Activation of Polyetheretherketone (PEEK) and Formation of Calcium Phosphate Coatings by Precipitation." J. Mater. Sci.- Mater. Med. (1997) 8: 683-690.

Lee, S.-J., B.-G. Paik, G.-B. Kim, Y.-G. Jang. "Self-Cleaning Features of Plasma-Treated Surfaces with Self-Assembled Monolayer Coating." Jpn. J. Appl. Phys. (2006)

Mahapatro, A., D. M. Johnson, D. N. Patel, M. D. Feldman, A. A. Ayon, C. M. Agrawal. "Surface Modification of Functional Self-Assembled Monolayers on 316L Stainless Steel Via Lipase Catalysis." Langmuir (2006) 22: 901-905.

Widmer, M. R., M. Heuberger, J. Vörös, N. D. Spencer. "Influence of Polymer Surface Chemistry on Frictional Properties under Protein-Lubrication Conditions: Implications for Hip-Implant Design." Tribol. Lett. (2001) 10: 111-116.

Lee, S. J., B. G. Paik, G. B. Kim, Y. G. Jang. "Self-Cleaning Features of Plasma-Treated Surfaces with Self-Assembled Monolayer Coating." Jpn. J. Appl. Phys. (2006).

El Mecanismo de Higgs

G. $\operatorname{Germán}^*$

Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 48-3, 62251 Cuernavaca, Morelos, México

1. Introducción

El Mecanismo de Higgs describe una manera de dar masa a los campos vectoriales intermedios W^+, W^- y Z_0 y un campo residual, el Bosón de Higgs, da masa a fermiones a través de interacciones tipo Yukawa. El Premio Nobel de Física 2013 fue otorgado a Peter W. Higgs y a Fracois Englert por el desubrimiento teórico de un mecanismo que contribuye a nuestra comprensión del origen de la masa de partículas subatómicas, y que fue confirmado recientemente a través del descubrimiento de la partícula fundamental predicha, por los experimentos ATLAS y CMS en el Gran Colisionador de Hadrones en CERN.

En estas notas intentamos dar una descripción en un contexto simplificado del *Mecanismo* de Higgs, para ello se hará antes una breve descripción de aspectos generales de partículas elementales, posteriormente se discutirá el rompimiento espontáneo de simetría y el concepto de bosones de Goldstone, para llegar entonces al Mecanismo de Higgs y finalmente tocar en forma muy breve el tema del bosón de Higgs.

2. Generalidades

El Modelo Estándar de partículas elementales incluye las fuerzas electromagnética, débil y fuerte. No incluye a la gravedad. La fuerza electromagnética se da entre partículas con carga eléctrica: electrones, protones etc., y da lugar a la formación de sistemas tales como átomos y moléculas, etc. La fuerza débil ocurre entre partículas con carga débil y es responsable de los decaimientos nucleares. La fuerza fuerte se da entre partículas con carga de *color* tales como quarks y gluones mismos que forman bariones (protón, neutrón, etc.) y mesones (piones, etc.) que en conjunto se les llama hadrones. Toda la materia está compuesta de quarks y leptones e interaccionan mediante el intercambio de los portadores de fuerzas (bosones), tales como el fotón, W^+, W^-, Z_0 y gluones. A altas energías estos bosones se comportan en

^{*}Correo-e: gabriel@fis.unam.mx.

Properties of the Interactions The strengths of the interactions (forces) are shown relative to the strength of the electromagnetic force for two u quarks separated by the specified distances.						
Property	Gravitational Interaction	Weak Interaction (Electro	Electromagnetic Interaction	Strong Interaction		
Acts on:	Mass – Energy	Flavor	Electric Charge	Color Charge		
Particles experiencing:	All	Quarks, Leptons	Electrically Charged	Quarks, Gluons		
Particles mediating:	ticles mediating: Graviton (not yet observed)		γ	Gluons		
Strength at $\begin{cases} 10^{-18} \text{ m} \\ 3 \times 10^{-17} \text{ m} \end{cases}$	10 ⁻⁴¹	0.8	1	25		
	10 ⁻⁴¹	10 ⁻⁴	1	60		

Figura 1: Propiedades de las interacciones

Las intensidades de las interacciones (fuerzas) se muestran relativas a la intensidad de la fuerza electromagnética para dos quarks u separados por las distancias especificadas.

Baryons qqq and Antibaryons q̄q̄q̄ Baryons are fermionic hadrons. These are a few of the many types of baryons.						
Symbol	Name	Quark content	Electric charge	Mass GeV/c ²	Spin	
р	proton	uud	1	0.938	1/2	
p	antiproton	ūūd	-1	0.938	1/2	
n	neutron	udd	0	0.940	1/2	
Λ	lambda	uds	0	1.116	1/2	
Ω-	omega	SSS	-1	1.672	3/2	

Figura 2: Bariones qqq y antibariones $\bar{q}\bar{q}\bar{q}$ Los bariones son fermiones hadrónicos constituídos por 3 quarks.

Mesons qq Mesons are bosonic hadrons These are a few of the many types of mesons.						
Symbol	Name	Quark content	Electric charge	Mass GeV/c ²	Spin	
π+	pion	ud	+1	0.140	0	
K ⁻	kaon	sū	-1	0.494	0	
ρ+	rho	ud	+1	0.776	1	
\mathbf{B}^0	B-zero	db	0	5.279	0	
η _c	eta-c	cē	0	2.980	0	

Figura 3: Mesones $q\bar{q}$

Los mesones son bosones hadrónicos constituídos por un quark y un antiquark.

forma similar: todos ellos tienen espín 1 y masa 0. A bajas energías los W^+, W^- y el Z_0 son masivos (80-90 GeV). Éstos fueron descubiertos en los años 1983-1984. Por otro lado todas estas fuerzas surgen de simetrías de norma. Simetrías de norma, sin embargo, no permiten

FERMIONS matter constituents spin = 1/2, 3/2, 5/2,							
Leptons spin =1/2				Quarks spin =1/2			
Flavor	Mass GeV/c ²	Electric charge		Flavor	Approx. Mass GeV/c ²	Electric charge	
VL lightest neutrino*	(0-0.13)×10 ⁻⁹	0		U up	0.002	2/3	
e electron	0.000511	-1		d down	0.005	-1/3	
M middle neutrino*	(0.009-0.13)×10 ⁻⁹	0		C charm	1.3	2/3	
μ muon	0.106	-1		S strange	0.1	-1/3	
\mathcal{V}_{H} heaviest neutrino*	(0.04-0.14)×10 ⁻⁹	0		t top	173	2/3	
τ tau	1.777	-1		b bottom	4.2	-1/3	

Figura 4: Fermiones Los fermiones se dividen en leptones y en quarks.



Figura 5: Bosones Los bosones son los portadores de las fuerzas.

un término explícito de masa para los bosones portadores de las fuerzas. Cómo entender entonces bosones masivos en una teoría de norma? Podemos dar una masa explícita a los W's y el Z_0 pero estos términos romperían la simetría de la teoría, esto es, haría inconsistente a la teoría al volverse no-renormalizable. Como consecuencia de un término explícito de masa el Modelo Estándar perdería su poder predictivo: surgirían infinitos en la teoría, asociados con integrales divergentes, que no podrían ser eliminados.

3. Rompimiento espontáneo de simetría

Rompimiento espontáneo de simetría ocurre cuando el lagrangiano es invariante bajo un grupo de transformaciones pero el estado base del sistema (el estado de vacío en teoría de campos) no lo es. Ejemplo: un campo escalar real con autointeracción

$$L = \frac{1}{2}\partial_{\mu}\varphi\partial^{\mu}\varphi - \frac{1}{2}\mu^{2}\varphi^{2} - \frac{1}{4!}\lambda\varphi^{4}, \qquad (1)$$

donde el potencial está dado por

$$V(\varphi) = \frac{1}{2}\mu^2\varphi^2 + \frac{1}{4!}\lambda\varphi^4.$$
 (2)

Vemos que L es invariante bajo la transformación

$$\varphi \to -\varphi.$$
 (3)

Minimizando el potencial se obtiene

$$\left(\mu^2 + \frac{1}{3!}\lambda\varphi^2\right)\varphi = 0.$$
(4)

Como queremos un potencial acotado por abajo entonces $\lambda > 0$. La posición del mínimo depende del signo de μ^2 . Si $\mu^2 > 0$ la única solución es

$$\langle \varphi \rangle_0 = 0, \tag{5}$$

y entonces se dice que estamos en el modo de Wigner (ver Fig.(6)).

Ahora supongamos que el parámetro $\mu^2 < 0$, tendremos dos soluciones

$$\langle \varphi \rangle = \pm \sqrt{\frac{-6\mu^2}{\lambda}} \equiv \pm \nu.$$
 (6)

Este caso se ilustra también en la Fig.(6), y se dice que estamos en el modo de Goldstone. Para estudiar el lagrangiano en el estado de vacío escogido $+\nu$ definimos un nuevo campo

$$\varphi' = \varphi - \nu. \tag{7}$$

El lagrangiano resultante es ahora

$$L = \frac{1}{2} \partial_{\mu} \varphi' \partial^{\mu} \varphi' - \frac{1}{2} m^2 \varphi'^2 - \frac{1}{3!} \lambda \varphi'^3 - \frac{1}{4!} \lambda \varphi'^4, \tag{8}$$

donde $m^2 = 2|\mu^2|$. Vemos que el término cúbico rompe la simetría original del modelo $\varphi \rightarrow -\varphi$. En este caso decimos que la simetría ha sido rota espontáneamente.



Figura 6: Modos de Wigner y de Goldstone La figura de la izquierda muestra al sistema en el modo de Wigner en tanto que la de la derecha en el de Goldstone.

4. Bosones de Goldstone

Habrá A - B bosones de masa cero en una teoría en donde un subgrupo de dimensión A - B de un grupo de simetría G de dimensión A es espontáneamente rota.

Ejemplo: consideremos dos campos escalares reales con autointeracción

$$L = \frac{1}{2}\partial_{\mu}\varphi_{1}\partial^{\mu}\varphi_{1} + \frac{1}{2}\partial_{\mu}\varphi_{2}\partial^{\mu}\varphi_{2} - \frac{1}{2}\mu^{2}\left(\varphi_{1}^{2} + \varphi_{2}^{2}\right) - \frac{1}{4!}\lambda\left(\varphi_{1}^{2} + \varphi_{2}^{2}\right)^{2}.$$
(9)

Este lagrangiano es invariante bajo el grupo SO(2) de rotaciones en el plano (φ_1, φ_2).

$$\begin{pmatrix} \varphi_1' \\ \varphi_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \cos \alpha & \sin \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix},$$
(10)

La energía potencial está dada por

$$V(\varphi_1, \varphi_2) = \frac{1}{2}\mu^2 \left(\varphi_1^2 + \varphi_2^2\right) + \frac{1}{4!}\lambda \left(\varphi_1^2 + \varphi_2^2\right)^2.$$
(11)

Para $\mu^2 < 0,\,\lambda > 0$ los mínimos ocurren cuando (φ_1,φ_2) forman un círculo

$$\varphi_1^2 + \varphi_2^2 = \nu^2, \tag{12}$$

como antes $\nu^2 = -\frac{6\mu^2}{\lambda}$. Los estados de vacío son los puntos (φ_1, φ_2) sobre este círculo y se transforman entre ellos bajo SO(2). Al potencial resultante se le llama comúnmente *Mexican Hat Potential*, *Figs.* (7) y (8). Escogiendo uno de ellos como estado de vacío implica rompiminto espontáneo de simetría, por ejemplo:

$$(\varphi_1, \varphi_2) = (\nu, 0).$$
 (13)

Transformando a nuevos campos alrededor de este vacío

$$\varphi_1' = \varphi_1 - \nu, \qquad \varphi_2' = \varphi_2. \tag{14}$$

El lagrangiano es ahora

$$L = \frac{1}{2}\partial_{\mu}\varphi_{1}^{'}\partial^{\mu}\varphi_{1}^{'} + \frac{1}{2}\partial_{\mu}\varphi_{2}^{'}\partial^{\mu}\varphi_{2}^{'} - \frac{1}{2}m^{2}\varphi_{1}^{'2} - \frac{\lambda}{3!}\nu\left(\varphi_{1}^{'2} + \varphi_{2}^{'2}\right)\varphi_{1}^{'} - \frac{\lambda}{4!}\left(\varphi_{1}^{'2} + \varphi_{2}^{'2}\right)^{2}.$$
 (15)

Vemos que uno de los campos $\varphi_{1}^{'}$ adquiere una masa positiva

$$m = \sqrt{2|\mu^2|} = \sqrt{\frac{\lambda\nu^2}{3}}.$$
 (16)

Al campo de masa cero ϕ_2' se le llama Bosón de Goldstone.



Figura 7: Potencial de sombrero mexicano

Se muestra el potencial como función de las partes real e imaginaria del campo complejo φ .

5. El Mecanismo de Higgs

Una simetría **local** continua rota espontáneamente no genera bosones de Goldstone. Por esto los bosones de norma pueden adquirir masa sin romper la invariancia de norma (Mecanismo de Higgs). Consideremos el siguiente lagrangiano

$$L = \partial_{\mu}\varphi^{c}\partial^{\mu}\varphi - \mu^{2}\varphi^{c}\varphi - \frac{\lambda}{3!}\left(\varphi^{c}\varphi\right)^{2}, \qquad (17)$$

donde

$$V(\varphi) = \mu^2 \varphi^c \varphi + \frac{\lambda}{3!} \left(\varphi^c \varphi\right)^2, \qquad (18)$$

у

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_1 + i\varphi_2\right), \qquad \varphi^c = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_1 - i\varphi_2\right). \tag{19}$$

Este lagrangiano es invariante bajo la transformación global $\varphi' = e^{i\alpha}\varphi$, $\alpha = cte$. Consideremos ahora una transformación local de la forma

$$\varphi' = e^{iq\alpha(\chi)}\varphi, \quad \alpha = \alpha(\chi).$$
 (20)

Para que el lagrangiano anterior sea invariante debemos modificarlo introduciendo un campo de norma como sigue

$$L = D_{\mu}\varphi^{c}D^{\mu}\varphi - \mu^{2}\varphi^{c}\varphi - \frac{\lambda}{3!}\left(\varphi^{c}\varphi\right)^{2} - \frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}, \qquad (21)$$

donde

$$D_{\mu} = \partial_{\mu} + iqA_{\mu}, \qquad F^{\mu\nu} = \partial^{\mu}A^{\nu} - \partial^{\nu}A^{\mu}.$$
(22)

El campo de norma A_{μ} a su vez se transforma

$$A^{\prime \mu} = A^{\mu} - \partial^{\mu} \alpha(\chi). \tag{23}$$

Suponemos nuevamente que $\mu^2 < 0$, $\lambda > 0$. Entonces los mínimos ocurren para $|\varphi|^2 = \frac{1}{2}\nu^2$, $\nu^2 = -\frac{6\mu^2}{\lambda}$. De entre todos los mínimos escogemos como nuestro estado de vacío a

$$\varphi = \frac{\nu}{\sqrt{2}}, \quad \rightarrow \quad (\varphi_1, \varphi_2) = (\nu, 0).$$
 (24)

••• 64 •••

Transformando a nuevos campos alrededor del nuevo vacío

$$\varphi' = \varphi - \frac{\nu}{\sqrt{2}}, \quad \rightarrow \quad \varphi'_1 = \varphi_1 - \nu, \quad \varphi'_2 = \varphi_2.$$
 (25)

El lagrangiano resultante es

$$L = \frac{1}{2} \partial_{\mu} \varphi_{1}^{'} \partial^{\mu} \varphi_{1}^{'} - \frac{1}{2} m^{2} \varphi_{1}^{'2} + \frac{1}{2} \partial_{\mu} \varphi_{2}^{'} \partial^{\mu} \varphi_{2}^{'} - \frac{\lambda}{3!} \nu \left(\varphi_{1}^{'2} + \varphi_{2}^{'2}\right) \varphi_{1}^{'} + \frac{\lambda}{4!} \left(\varphi_{1}^{'2} + \varphi_{2}^{'2}\right)^{2} + \frac{1}{2} q^{2} \nu^{2} A^{\mu} A_{\mu} - F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}.$$
(26)

Lo interesante en el nuevo lagrangiano es el término $\frac{1}{2}q^2\nu^2 A^{\mu}A_{\mu}$ que corresponde a un término de masa para el campo de norma A^{μ} igual a $m_A = q\nu$. Sin embargo este lagrangiano tiene (aparentemente) 5 grados de libertad en tanto que el lagrangiano original tiene 4. Introduciendo nuevas variables podemos deshacernos del grado de libertad espurio

$$\varphi(\chi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\rho(\chi) + \nu \right) e^{iq\beta(\chi)}, \quad A_{\mu} = C_{\mu} - \frac{1}{\nu} \partial_{\mu} \beta(\chi).$$
(27)

De esta manera el lagrangiano original Ec. (21) termina escribiéndose, en términos de las nuevas variables, como sigue

$$L = \frac{1}{2} \partial_{\mu} \rho \partial^{\mu} \rho - \frac{1}{2} m_{\rho}^{2} \rho^{2} - \frac{\lambda}{3!} \nu \rho^{3} - \frac{\lambda}{4!} \rho^{4} - \frac{1}{2} q^{2} C^{\mu\nu} C_{\mu\nu} + \frac{1}{2} q^{2} \nu^{2} C^{\mu} C_{\mu} + \frac{1}{2} q^{2} C^{\mu} C_{\mu} \left(\rho^{2} + 2\rho\nu\right), \qquad (28)$$

donde ahora $m_C = q\nu$ es la masa del campo C^{μ} y $m_{\rho} = \sqrt{2|\nu^2|}$ es la masa del campo escalar ρ . El bosón de Goldstone, que en las nuevas variables correspondería a $\beta(\chi)$, desaparece contribuyendo al grado de libertad extra del campo masivo C^{μ} .

6. El Bosón de Higgs

En el Modelo Estándar W^+ , W^- y el Z_0 obtienen sus masas mediante el campo de Higgs, que es un doblete escalar complejo, esto es tiene 4 grados de libertad, o sea 4 componentes reales. Tres de estas componentes son *absorbidas* por los W^+ , W^- y el Z_0 en forma análoga a como se mostró anteriormente (Mecanismo de Higgs) obteniendo un grado de libertad extra (componente longitudinal) y por tanto masa. En su versión más básica el campo de Higgs es

$$\phi = \begin{pmatrix} \varphi_a \\ \varphi_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1 + i\varphi_2 \\ \varphi_3 + i\varphi_4 \end{pmatrix}.$$
 (29)

El cuarto grado de libertad (Bosón de Higgs) interacciona con fermiones del modelo, dándoles masa al romperse espontáneamente la simetría y adquirir éste un valor en el vacío (*vev*) distinto de cero. En forma por demás esquemática esto se puede ilustrar con una interacción de Yukawa como sigue

$$L_{HF} = \lambda \varphi_4 \bar{\psi}_f \psi_f \quad \to \quad \lambda \langle \varphi_4 \rangle \bar{\psi}_f \psi_f = m_\psi \bar{\psi}_f \psi_f. \tag{30}$$



Figura 8: Sombrero mexicano Una aportación nacional para el descubrimiento del *Higgs*.

Se cree que el Bosón de Higgs φ_4 correspondería a la partícula detectada recientemente en CERN.

Agradecimientos

Investigación realizada gracias al apoyo del "Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica" (PAPIIT) UNAM, IN103413-3, *Teorías de Kaluza-Klein, inflación y perturbaciones gravitacionales.*

Se agradece también al Dr. José Récamier por la gentileza de invitarme a participar en la XXI Escuela de Verano en Física, mediante la impartición de una plática, resumida en estas notas.

Referencias

- [1] J. Leite Lopes, Gauge Field Theory, Pergamon Press, 1981.
- [2] L. H. Ryder, Quantum Field Theory, Cambridge U. Press, 1996.
- [3] D. Bailin, A. Love, *Supersymmetric Gauge Field Theory and String Theory*, Graduate Student Series in Physics, University of Sussex, 1994.
- [4] D. J. Griffiths, *Introduction to Elementary Particles*, 2nd Revised Ed., Oxford University, 2008.
- [5] The Nobel Prize in Physics 2013, Lectures: www.nobelprize.org.
- [6] The Particle Adventure. http://www.particleadventure.org/

EL PROCESO DE MADURACIÓN CRISTALINA EN CRISTALES COLOIDALES EN 2D

Agustín E. González

Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad S/N, Col. Chamilpa, 62210 Cuernavaca, Morelos, México Email: agus@fis.unam.mx

RESUMEN

Se estudia el proceso de maduración cristalina bidimensional que ocurre en un policristal coloidal, formado por muchos granos cristalinos separados entre sí por las fronteras de grano, cuando una de estas fronteras desaparece, dando lugar entonces a un grano cristalino más grande formado por la unión de los dos granos cuya frontera desapareció. Al desaparecer más y más fronteras de grano, los granos continúan en su crecimiento, aunque esto ocurre a tiempos cada vez más largos (por órdenes de magnitud), terminando entonces con un policristal formado por unos cuantos granos cristalinos (separados por unas cuantas fronteras de grano) que aparentemente ya no se fusionan.

Las monocapas de partículas coloidales atrapadas por tensión superficial en la superficie libre de un líquido han sido propuestas como análogos bidimensionales (2D) de sistemas atómicos en fase condensada. El interés especial en las monocapas coloidales proviene de su capacidad para reproducir la cristalización y el fundido de cristales, con la ventaja adicional de que las posiciones y las trayectorias de las partículas individuales pueden ser monitoreadas con el simple uso de microscopía óptica en combinación con el procesamiento digital de imágenes. En particular, cristales que consisten de partículas coloidales son de interés para desarrollar materiales novedosos tales como los materiales con brechas de banda fotónicas o para ser usados como filtros ópticos, dado que la longitud de onda de la luz visible es del orden de magnitud del tamaño de las partículas coloidales o de la separación de los vecinos cercanos en un cristal coloidal.

Las simulaciones por computadora también ofrecen una oportunidad única para estudiar procesos que experimentalmente son muy difíciles de visualizar, como el proceso de cristalización. El poder variar a nuestro antojo los parámetros relevantes de dichos procesos, como el potencial de interacción entre las partículas, la concentración, la temperatura, etc., les confiere a dichas simulaciones un carácter imprescindible, sin las cuales nuestro conocimiento de esos procesos se vería empobrecido enormemente. Además, las herramientas computacionales ofrecen la posibilidad de visualizar los resultados de las simulaciones, los cuales se pueden comparar con, por ejemplo, la videomicroscopía del proceso de cristalización coloidal.

Motivados por todo esto, estamos desarrollando una línea de investigación de la cristalización coloidal vía simulaciones por computadora. Ya hemos obtenido resultados nuevos del proceso de nucleación cristalina en 2D [1, 2], que ocurre cuando se forman pequeñas regiones cristalinas (cristalitos) a partir de las fluctuaciones estructurales en un líquido. Estos cristalitos la mayor parte de las veces se empequeñecen y desaparecen aunque, muy de vez en cuando, si son suficientemente grandes, empiezan a crecer aún más para formar los cristales. Esto quiere decir que existe un tamaño crítico (N_c) para los cristalitos tal que si un cristalito está abajo de este tamaño crítico, decrece y desaparece, mientras que si un cristalito se forma arriba de este tamaño crítico (lo que ocurre muy rara vez), continúa creciendo aún más para formar un grano cristalino. Encontramos entonces que las fronteras de los cristalitos tienen una estructura fractal [3], cuya dimensionalidad fuimos capaces de medir [1, 2]. Se observó que, para el potencial utilizado, los cristalitos abajo del tamaño crítico tenían una frontera con dimensión fractal (d_f) de alrededor de 1.32 (nótese como comparación que una línea recta tiene, por definición, una $d_f = 1$), mientras que para aquellos arriba de N_c su d_f era de alrededor de 1.12, lo que indica que los cristalitos pequeños tienen una frontera más rugosa que los granos cristalinos más grandes. Se encontró además, en nuestro caso, que N_c se encontraba entre 70 y 80 partículas.

Para ejemplificar todo esto, en las figuras 1-3 mostramos cristalitos y cristales abajo de N_c , alrededor de N_c y arriba de N_c . Notamos en estas figuras la formación de cristalitos y granos cristalinos con simetría de red triangular, lo cual es la regla para sistemas unicomponentes en 2D con potencial de interacción isotrópico. A medida que los granos cristalinos arriba de N_c continúan creciendo, llega un momento que se empiezan a tocar unos con otros, formándose entonces las fronteras de grano. Notamos que dos de estos granos que se tocan no se pueden unir *inmediatamente*, por tres razones simples. Primero porque los ejes de simetría de los dos granos no coinciden en su orientación, segundo porque aún en el caso extremadamente raro de que encontráramos que dichos ejes más o menos coincidieran en su orientación, habría una discordancia traslacional de dichos ejes que les impediría suporponerse unos con otros. Finalmente, la tercera razón estriba en que, como ya lo vimos, las fronteras de dichos granos no son lisas sino rugosas, al menos para el caso de cristales coloidales, lo que dificulta aún más la fusión de estos granos. Por estos motivos es que se forman las fronteras de grano. Sin embargo, si uno espera un tiempo suficientemente largo, es posible que dichas fronteras desaparezcan, fusionándose así dos de estos granos en uno solo. A esto se le conoce como el proceso de "maduración cristalina". El propósito de este artículo es describir dicho proceso para el caso de cristales coloidales, usando simulaciones por computadora en 2D.

Experimentalmente y para el caso de 2D, P. Pieranski [4] fue el primero en estudiar el ordenamiento de partículas coloidales de latex en la interfaz aire-agua, lo que se atribuyó a las fuerzas repulsivas de largo alcance entre las partículas *confinadas*. Sin embargo, para el estudio del ordenamiento en sistemas diluidos, se requieren fuerzas atractivas entre las partículas en lugar de fuerzas repulsivas. G. Y. Onoda [5] fue el primero que tuvo éxito en encontrar las partículas correctas, que consistían en partículas de poliestireno estabilizadas con dodecil sulfato de sodio injertado en sus superficies. Con este tensoactivo, él evitó que las partículas coloidales se agregaran mientras que mantenía aún la atracción de van der Waals entre ellas. En las fotografías mostradas por este autor, se puede ver claramente que las fronteras de los cristalitos tienen una estructura rugosa, posiblemente fractal, aunque no le prestó atención a este hecho.

Simulacionalmente, considerando que las partículas que cristalizan son coloides mesoscópicos atrapados en la superficie libre de un líquido, el procedimiento simulacional *ad hoc* debe ser un Monte Carlo cinético con pasos aleatorios pequeños de las partículas, dado que dichas partículas coloidales están efectuando ese tipo de movimiento difusivo. El Monte Carlo cinético, que es una forma de resolver la ecuación maestra exacta, debe ser complementado con las probabilidades de transición aproximadas de un estado al siguiente. A este respecto, Kikuchi *et al* han demostrado [6, 7, 8] que al utilizar una dinámica de Metropolis en la ecuación maestra [9] pueden recuperar la ecuación de difusión de Fokker-Planck. La única restricción impuesta en su derivación fue que los desplazamientos máximos permisibles a una partícula deben ser lo suficientemente pequeños comparados con el tamaño del sistema y con las irregularidades del potencial entre las partículas [8]. Por lo tanto, una simulación



Figure 1: Una sección de la caja de la simulación en donde, a la izquierda, se muestran todas las partículas en esa sección mientras que, a la derecha, se muestran únicamente las partículas que pertenecen a cristalitos con más de 10 partículas. Todos los cristalitos en la Fig. 1(b) están abajo del tamaño crítico, como se demostró en la Ref. [1].



Figure 2: Una sección de la caja de la simulación en donde en (a) se muestran todas las partículas en esa sección, mientras que en (b) se muestran únicamente las partículas que pertenecen a cristalitos con más de 10 partículas. En este caso obtenemos un solo cristalito con 75 partículas, que está en el rango del tamaño de cristalito crítico N_c .



Figure 3: Un ejemplo de un cristal más compacto y redondeado, arriba del tamaño crítico



Figure 4: El potencial de interacción entre dos partículas. La distancia r se ha escalado con el diámetro del disco duro, mientras que la energía potencial V se ha escalado por $k_B T$.

de Monte carlo cinético con dinámica de Metropolis es equivalente a una simulación de dinámica Browniana.

Consideramos entonces $N_{tot} = 53715$ discos monodispersos distribuidos aleatorioamente en una caja con condiciones de frontera periódicas, teniendo cuidado de no traslapar los discos duros. Dichos discos duros ocupan una fracción de área $\phi = 0.15$. El tamaño de nuestro sistema es lo suficientemente grande y la fracción de área lo suficientemente pequeña que efectos de tamaño finito se pueden despreciar durante el curso de la cristalización [10]. La fracción de área pequeña también evita que los granos cristalinos percolen la caja de la simulación, lo que podría limitar la difusión de las partículas y, a su vez, podría cambiar los valores de las dimensiones fractales obtenidas. En simulaciones de nucleación cristalina, una buena parte de la incertidumbre proviene de la definición de los cristalitos [11], los cuales son cúmulos muy imperfectos con la simetría del cristal a formar. En el caso de interacciones atractivas, esto se debe probablemente a la anchura de los pozos de potencial usados, como el potencial de Lennard-Jones. Para superar esta dificultad, experimentamos con diferentes pozos de potencial estrechos, que definirían con mayor precisión la separación de dos partículas enlazadas, hasta que llegamos al que se muestra en la Fig. 4. La expresión matemática para dicho potencial viene dada por

$$\frac{V}{k_B T} = \frac{75}{r^3} \exp(-2.5 (r-1)) \cos(10 (r-1)^4) , \qquad (1)$$

en donde r es la distancia entre partículas normalizada por el disco duro. Cuando el coseno se hace cero por segunda ocasión (alrededor de $r \simeq 1.8$), el potencial se considera cero de ahí en adelante.

El algoritmo es como sigue:

- 1. Se escoge una partícula al azar y se mueve un paso de longitud igual a un décimo del diámetro del disco duro en una dirección aleatoria
- 2. Se calcula la nueva energía de interacción U_f a la que se le sustrae la inicial: $\Delta U = U_f U_i$.
- 3. Si $\Delta U \leq 0$ se acepta el movimiento.
- 4. Si $\Delta U > 0$ únicamente se acepta el movimiento si $exp(-\Delta U/k_BT) > R$, en donde R es un número aleatorio uniformemente distribuido en [0,1).



Figure 5: (a) Dos granos cristalinos arriba del tamaño crítico, mostrados al tiempo de Monte Carlo $\Delta t = 6101$, que se empiezan a tocar en su crecimiento. Notamos cómo los ejes de simetría de ambos cristales difieren en su orientación. (b) Al avanzar hasta el tiempo $\Delta t = 6801$, la frontera de grano formada se trata de recristalizar en su parte izquierda, aunque los ejes de simetría de ambos granos no logran coincidir exactamente.



Figure 6: (a) Los mismos dos granos cristalinos de la Fig. 5(b) cuya frontera de grano ha sanado en ambos lados, al tiempo de Monte Carlo $\Delta t = 8001$. (b) A la figura (a) se le ha añadido un circuito de Burguers, recorrido en sentido contrario a las manecillas del reloj (según una de las convenciones en la literatura), que consiste de 3 lados de longitud de 12 espaciamientos de la red, a lo largo de los 3 ejes de simetría del cristal. El vector de Burguers que se muestra une el punto inicial con el punto final de dicho circuito.

5. En cualquiera de los dos últimos casos el tiempo de Monte Carlo t se aumenta por $1/N_{tot}$. Nos vamos entonces al punto 1.

Cuando $\Delta t = 1$, que define una barrida de Monte Carlo, cada partícula ha intentado moverse una vez *en promedio*.

Al analizar las figuras de la simulación, notamos la formación de cristalitos muy pequeños y fugaces con simetría triangular, que aparecían y desaparecían rápidamente, y no fue sino hasta un tiempo de Monte carlo de alrededor de $\Delta t = 5000$ que empezamos a ver la aparición de algunos cristales arriba del tamaño crítico: los pequeños desapareciendo casi inmediatamente después de la formación, mientras que algunos pocos de los más grandes empezaron a crecer, indicando que nos encontramos en el régimen sobreenfriado y sobresaturado. En la Fig. 5(a) se pueden apreciar dos de estos granos cristalinos, al tiempo de Monte Carlo $\Delta t = 6101$, que están arriba del tamaño crítico y que se empiezan a tocar para formarse la frontera de grano, mientras que en la Fig. 5(b), para $\Delta t = 6801$, notamos que en la parte izquierda de dicha frontera las partículas de ambos granos se "tratan" de alinear a un solo eje de simetría. A pesar de esto, no lo logran, quedando una discrepancia o inclinación aunque pequeña en la orientación de los ejes de simetría a ambos lados de la frontera. Al proceso de cristalización de parte de la frontera de grano, en este caso de la parte izquierda. se le llama el "sanado" (healing, en inglés) de dicha frontera. Al continuar avanzando el tiempo, continúa el sanado de la frontera. En la Fig. 6(a), para el tiempo $\Delta t = 8001$, ahora es la parte derecha de la frontera de grano que aparentemente también ha "sanado", dejando una vacancia amorfa dentro del nuevo grano cristalino formado por la unión de los dos originales. Sin embargo, esta vacancia no es como las vacancias usuales en las que uno simplemente elimina o suprime una partícula del cristal (o más partículas advacentes, para tener vacancias dobles, triples, etc.). En este último caso no se destruye la simetría del cristal. Un ejemplo de estas últimas vacancias lo podemos observar en la Fig. 3, en la que se nota que a pesar de la ausencia de una partícula (vacancia unitaria) dentro del cristal, los ejes de simetría de dicho cristal parecen muy bien definidos. Para corroborar que la vacancia que aparece en la Fig. 6(a) es **más** que solamente una vacancia, se construye un circuito de Burgers, que mostramos en la Fig. 6(b), que en el espacio cristalino es un polígono con lados iguales. En este caso hemos tratado de encerrar esta vacancia con un triángulo que podría ser equilátero si la simetría del cristal fuera perfecta, dado que dicho circuito de Burguers consiste de 3 lados, cada uno de longitud de 12 espaciamientos de la red. Si tuviéramos una simetría perfecta para el nuevo grano cristalino, el punto inicial y el punto final del circuito de Burguers coincidirían. Esto no ocurre así, según podemos ver en la Fig. 6(b) y, del punto inicial al punto final del circuito de Burguers (recorrido en sentido contrario a las manecillas del reloj, según una de las convenciones existentes en la literatura), podemos trazar un vector del tamaño de un espaciamiento de la red que se muestra en dicha figura. A éste se le conoce como el vector de Burguers.

El hecho de que exista un vector de Burguers diferente de cero indica que la vacancia amorfa que se muestra en la Fig. 6 contiene una dislocación. Esto se traduce en que existan más hileras de partículas entrando al interior del circuito de Burguers por un lado que las que salen por el otro. Para cristales con simetría triangular como el que estamos estudiando, esto generalmente ocurre en dos de las tres direcciones de simetría del cristal; de hecho son aquellas dos direcciones diferentes a la que tiene el vector de Burguers. La dirección del vector de Burguers en nuestro caso de simetría triangular, es aquella dirección del eje de simetría que más se acerca a la perpendicular a la línea de la frontera de grano (véase la Fig. 5(b) para localizar la línea de la frontera de grano). Como hemos observado en las Figs. 5 y 6, los ejes de simetría de los dos cristales que aparentemente se unieron, lo hicieron formando un cierto ángulo ligeramente diferente a 180°. No es difícil darse cuenta que el mayor número de hileras que entran al circuito de Burguers proviene de la zona donde el ángulo es mayor a 180°, mientras que el menor número de las que salen ocurre en la zona donde el ángulo es menor a dicha cantidad. Esto es de esperarse así porque en la zona donde el ángulo es mayor "caben", por decirlo así, más hileras de partículas.

La presencia de la dislocación en nuestro cristal indica que existen esfuerzos no balanceados en el grano cristalino [12]. El cristal se encuentra "incómodo" con la dislocación y "desea" liberar dichos esfuerzos. De alguna forma, la dislocación tiene que "salir" del cristal. En la Fig. 7(a), para el tiempo $\Delta t = 8501$ vemos la forma que ha optado el cristal para deshacerse de la dislocación: Se abre un pequeño canal en una zona donde salen menos hileras de partículas, que esté en aquella dirección más cercana a la frontera del cristal con el fluido que lo rodea, similar a un absceso que se abre en la piel para permitir el desalojo de


Figure 7: (a) En esta figura podemos apreciar, para el tiempo $\Delta t = 8501$, la forma en que el cristal trata de eliminar la dislocación, abriendo un pequeño canal hacia la frontera con el fluido circundante, en una zona donde salen menos hileras de partículas, que va a ser llenado primero con partículas adyacentes al canal y luego con partículas del fluido circundante. (b) Continúa el llenado de dicho canal con más partículas, al tiempo $\Delta t = 10001$.



Figure 8: Al tiempo $\Delta t = 10501$ vemos que ha terminado la eliminación de la dislocación, la que podemos decir que "salió" por la frontera superior izquierda del nuevo grano cristalino. Notamos cómo los tres ejes de simetría del cristal se encuentran ahora perfectamente bien definidos.

material infectado. Dicho canal se empieza a llenar de partículas, como podemos apreciar en la Fig. 7(b) para el tiempo $\Delta t = 10001$, provenientes de partículas de las paredes del mismo canal y del fluido que rodea al cristal. Finalmente, en la Fig. 8 para el tiempo $\Delta t = 10501$, vemos que el canal ha desaparecido y que el cristal ha sanado completamente. Es interesante notar que las dislocaciones complejas (que contienen vacancias como la que observamos) son más móviles y dinámicas que las vacancias puras (que no contienen dislocaciónes). En la Fig. 7(a) ($\Delta t = 8501$) podemos observar la formación de una vacancia pura alrededor de las coordenadas (237,409) que, al transcurrir hasta el tiempo $\Delta t = 10501$ (Fig. 8), únicamente se movió hasta las coordenadas (235,411). Esto indica que las vacancias puras están más afianzadas al cristal que las dislocaciones. También notamos en la parte superior derecha de la figura 8 que ha aparecido otra frontera de grano más grande, que describiremos a continuación.



Figure 9: Aspecto de una frontera de grano a los tiempos (a) $\Delta t = 9001$, (b) $\Delta t = 28001$, (c) y (d) $\Delta t = 68001$



Figure 10: La forma en que el cristal se deshace de las dislocaciones complejas, a los tiempos (a) $\Delta t = 72501$, (b) $\Delta t = 80001$, (c) $\Delta t = 80501$ y (d) $\Delta t = 89001$... 75 ...



Figure 11: El seguimiento de la última dislocación compleja dentro de un grano cristalino, a los tiempos (a) $\Delta t = 95001$, (b) $\Delta t = 99001$, (c) $\Delta t = 101001$ y (d) $\Delta t = 101501$ $\cdots 76 \cdots$

En la Fig. 9(a), para el tiempo $\Delta t = 9001$, observamos dos granos cristalinos que se empiezan a tocar, siendo el grano inferior el que acabamos de describir en su formación. Hacia el tiempo $\Delta t = 28001$ (Fig. 9(b)) vemos que se ha establecido una frontera de grano amplia pero que aún no ha sufrido un proceso de sanación en sus extremos. Se ha tenido que esperar hasta el tiempo $\Delta t = 68001$ (Fig. 9(c)) para que el proceso de sanación haya ocurrido en ambos extremos, dejando encerradas 4 vacancias amorfas que contienen, cada una, una dislocación unitaria con el mismo vector de Burguers apuntando hacia arriba y a la derecha. Esto se puede observar en la Fig. 9(d), en donde se muestran los 4 circuitos de Burguers. De hecho, si pudiéramos considerar un solo circuito de Burguers que encerrara todas las dislocaciones complejas, obtendríamos un vector de Burguers apuntando en la misma dirección con magnitud de 4 espaciamientos de la red en lugar de uno solo. Esto proviene del hecho de que los vectores de Burguers se pueden sumar para obtener la magnitud de la dislocación total [12]. Notamos además que los 4 vectores de Burguers se encuentran en el mismo eje de simetría que el vector de Burguers estudiado anteriormente, dentro del grano cristalino inferior en la Fig. 9(a), sólo que con un sentido opuesto. Que se encuentren en el mismo eje de simetría del cristal indica que dicho eje es el más cercano en dirección a la perpendicular a la línea de la frontera de grano en la Fig. 9(b). El que tengan sentido opuesto proviene del hecho de que el ángulo mayor a 180° , en la Figs. $9(a) \ge 9(b)$, se encuentra ahora situado en el lado opuesto del eje al del caso anterior.

A continuación veremos la forma en que el cristal se deshace de las 4 dislocaciones complejas que hemos encontrado dentro del cristal. En la Fig. 10(a), para el tiempo $\Delta t = 72501$, vemos que la que se encuentra más a la derecha ha "salido" por la frontera simplemente al abrirse dicha frontera. Nuevamente es como si se abriera la piel para eliminar el material infectado en un absceso. En la Fig. 10(b), correspondiente a $\Delta t = 80001$, observamos ahora que dicha frontera a la derecha ha sanado y además que la dislocación que se encuentra más a la izquierda ha migrado hacia arriba, saliendo por la frontera izquierda. La movilidad de esta dislocación contrasta con la estacionariedad de la vacancia pura que observamos alrededor de las coordenadas (245,428). Al tiempo $\Delta t = 80501$ (Fig. 10(c)) vemos que esta frontera izquierda ha sanado completamente. De la Fig. 10(d), para el tiempo $\Delta t = 89001$, vemos que la dislocación compleja que está abajo a la derecha ha salido en esta ocasión por la frontera derecha. Nos quedamos entonces con una sola dislocación muy en el interior dentro del grano cristalino. En la Fig. 11 seguimos el movimiento de dicha dislocación observando que, dado que no "presiente" la presencia de las fronteras del grano con el fluido, se queda migrando dentro de dicho grano, en una forma probablemente aleatoria. Finalmente, en la Fig. 11(c) para el tiempo $\Delta t = 101001$, observamos que ya se encuentra muy cerca de la frontera de nuestro grano cristalino, para salir por ahí y desaparecer. En la Fig. 11(d) para el tiempo $\Delta t = 101501$ se muestra cuando la dislocación ya desapareció. Ahora los ejes de simetría del cristal ya están muy bien definidos, y las únicas imperfecciones de dicho cristal consisten de unas cuantas vacancias puras, que no deforman la simetría del cristal. Sin embargo, observamos en la parte superior de la Fig. 11(d) la formación de nuevas fronteras de grano, con otros granos cristalinos.

Es necesario reiterar que este proceso de desaparición de fronteras de grano ocurre bajo tres condiciones: (1) Que los ejes de simetría de los dos cristales cuya frontera de grano va a desaparecer estén más o menos alineados, i.e., que el ángulo formado por dichos ejes no rebase unos $12^o - 15^o$, digamos. (2) Que la frontera de grano no sea muy grande. (3) Que los dos cristales que se van a fusionar no tengan fronteras de grano con otros cristales. Si esto no fuera así, en principio es posible la fusión de dos de estos cristales, pero para lo cual habría que esperar un tiempo extremadamente largo, tanto experimental como simulacionalmente.



Figure 12: El estado de la caja de la simulación al tiempo $\Delta t = 111001$.

En la Fig. 12 observamos la caja completa de la simulación a un tiempo del orden del mostrado en la Fig. 11(d). En dicha figura podemos observar que el sistema consiste ahora de 6 granos cristalinos (tomando en cuenta las periodicidad de las fronteras de la caja), todos los cuales hacen frontera con dos o más granos, excepto uno de ellos. Sin embargo, este grano en particular hace frontera con otro cuvos ejes de simetría hacen un ángulo de poco menos de 30° con los del primero. 30° es el máximo ángulo entre los ejes de 2 granos que se tocan, por lo que sería muy difícil la fusión de esos dos granos. Esta es la razón por la que la mayor parte de los metales y otros cristales son en realidad policristales, que consisten de granos cristalinos separados por las fronteras de grano. Como la mayor parte de las propiedades no deseadas de los cristales (como la facilidad de fractura, la corrosión, etc.) ocurren en las fronteras de grano, es imperativo continuar estudiando estas estructuras para tratar de evitar su aparición. Una posibilidad podría ser el cristalizar a bajas densidades, para evitar el contacto muy temprano entre granos cristalinos, o a temperaturas más altas, para tener partículas con mayor movilidad. Por todo esto, podemos ver que el proceso de cristalización es un campo abierto, con muchas posibilidades de aplicación para la mejoría de los materiales cristalinos.

El autor agradece a DGAPA-UNAM (proyecto PAPIIT IN-106008) por el apoyo parcial. Agradece también al Comité de Supercómputo de la UNAM por los recursos computacionales asignados a través de DGTIC-UNAM.

References

- [1] A. E. González y L. Ixtlilco-Cortés, Phys. Lett. A 376, 1375 (2012).
- [2] A. E. González, en las Memorias de la XX Escuela de Verano en Física (Editorial Libros UNAM, México, 2013).
- [3] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (W. H. Freeman & Co., San Francisco, 1988).
- [4] P. Pieranski, Phys. Rev. Lett. 45, 569 (1980).
- [5] G. Y. Onoda, Phys. Rev. Lett. 55, 226 (1985).
- [6] K. Kikuchi, M. Yoshida, T. Maekawa y H. Watanabe, Chem. Phys. Lett. 185, 335 (1991).
- [7] K. Kikuchi, M. Yoshida, T. Maekawa y H. Watanabe, Chem. Phys. Lett. 196, 57 (1992).
- [8] M. Yoshida y K. Kikuchi, J. Phys. Chem. 98, 10303 (1994).
- [9] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller y E. Teller, J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953).
- [10] J. D. Honeycutt y H. C. Andersen, Chem. Phys. Lett. 108, 535 (1984).
- [11] J. D. Honeycutt y H. C. Andersen, J. Phys. Chem. 90, 1585 (1986).
- [12] F. R. N. Nabarro, Theory of Crystal Dislocations (Oxford University Press, London, 1967).

Las dimensiones extra y algunos problemas de la física moderna

Alfredo Herrera–Aguilar Instituto de Ciencias Físicas Universidad Nacional Autónoma de México aha@fis.unam.mx

1 Resumen

Una de las interrogantes que puede revolucionar nuestra cosmovisión actual con respecto al Universo en que vivimos está relacionada con la existencia de más de tres dimensiones espaciales. De manera curiosa, toda una serie de problemas relevantes de la física moderna como el de la jerarquía de masas (por qué la gravedad es tan débil comparada con las demás fuerzas fundamentales), el de la materia oscura, el de la pequeñez de la constante cosmológica o la existencia de la energía oscura, el de la isotropización del Universo temprano, entre otros, se pueden resolver si incluimos dimensiones espaciales adicionales. Asimismo, en este paradigma, actualmente conocido como mundos membrana (braneworlds), surgen nuevas cuestiones como por qué no observamos las dimensiones adicionales, cuál es el mecanismo responsable de la localización de la gravedad y los diversos campos de materia tetradimensional en nuestro mundo membrana, que básicamente se traduce en recuperar consistentemente en cierto límite tanto la ley de la gravitación que experimentamos como la física de altas energías que observamos en los experimentos, entre otros. Por tal razón, en el marco de la serie de experimentos multidisciplinarios del proyecto denominado Gran Colisionador de Hadrones (LHC por sus siglas en inglés) que actualmente se lleva a cabo en el acelerador de partículas elementales del Centro Europeo de Investigaciones Nucleares (CERN por sus siglas en francés) de Ginebra, Suiza, se ha propuesto un experimento gravitatorio que puede avudarnos a responder a la cuestión antes planteada. De manera cualitativa se puede decir que las leyes de la física que conocemos como la ley de la gravitación universal de Newton y la ley de Coulomb se pueden ver modificadas por pequeñas correcciones provenientes de las dimensiones extra. En este trabajo se muestra cuál es la forma analítica de dichas correcciones si tomamos en cuenta que nuestro Universo está modelado por una membrana gruesa en expansión puramente geométrica (es decir, generada por pura gravedad con constantes cosmológicas sin la inclusión de campos escalares) inmersa en un espaciotiempo pentadimensional. La importancia de estas predicciones teóricas radica en que pueden ser corroboradas experimentalmente; por ejemplo, las correcciones a la ley de Newton se pueden confrontar con los resultados de alta precisión que se obtendrán en el marco del experimento gravitatorio realizado en el LHC. Cabe señalar que existen otros modelos teóricos que emplean membranas delgadas para obtener las correcciones a la ley de Newton; no obstante, éstos poseen singularidades desnudas en la posición de la membrana, hecho que significa que estamos viviendo en una membrana singular, lo cual es inconcebible desde el punto de vista gravitatorio. En nuestro modelo se considera que la membrana tiene en realidad cierto grosor, se encuentra en expansión y está modelada por la curvatura que generan las constantes cosmológicas en cuatro y cinco dimensiones. De este modo, la singularidad se suaviza y en el modelo también se obtienen generalizaciones regulares de los resultados obtenidos con membranas delgadas, a saber, tanto la solución geométrica al problema de la jerarquía de masas como la localización de la gravedad y el electromagnetismo tetradimensionales en un espaciotiempo de cinco dimensiones. Además, en este modelo tan sencillo se pueden describir cualitativamente procesos cosmológicos interesantes como la isotropización del Universo temprano o la expansión acelerada que este experimenta actualmente, la reducción del número de dimensiones espaciales donde el Universo se expande de n a tres como en nuestro mundo (este es un útil mecanismo dinámico de reducción dimensional para las teorías multidimensionales como la teoría de cuerdas), etc.

2 Introducción

Desde pequeños nos hacemos preguntas interesantes como las siguientes: ¿Por qué existimos? ¿Qué es la realidad? ¿Qué es la vida? ¿Cómo experimentamos nuestra existencia? ¿Cómo es el Universo que nos rodea? ¿Dónde ocurren los fenómenos? ¿Cómo estudiamos los fenómenos naturales? ¿Qué es el espacio y el tiempo? ¿Cuál es su estructura? ¿Es diferente el macro del micromundo? A medida que profundizamos en estos cuestionamientos nos damos cuenta de que poco acceso tenemos a sus respuestas definitivas. De este modo el hombre va limitando el ámbito de sus preguntas y sus interrogantes se van haciendo más concretas, más limitadas.

En la primaria aprendemos que existen animales que tienen más desarrollados ciertos sentidos que el hombre; de igual manera, hay especies que poseen ciertos sentidos más limitados con respecto a los nuestros. Así, algunos animales solo ven un espectro reducido de la gama de colores que el ser humano puede apreciar, por ejemplo, los perros ven en blanco y negro, y una abeja ve su entorno como un fondo gris en el que las flores destacan con colores brillantes. Sin embargo, el sentido de la vista está muy desarrollado en algunas aves como el águila. De igual forma, algunos animales tienen pupilas muy peculiares, por ejemplo, algunas aves como los búhos y las lechuzas tienen pupilas que se agrandan hasta ocupar casi todo el ojo, hecho que les permite localizar con mayor facilidad a su presa cuando cazan en la noche; por otro lado, los felinos poseen pupilas que pueden dilatarse y reducirse con gran facilidad, pues necesitan pupilas con la capacidad de agrandarse cuando haya poca luz y reducirse casi hasta formar una pequeña línea cuando haya luz intensa que podría dañar su visión. Del mismo modo, existen insectos que son capaces de emitir y recibir muchas clases de sonidos imperceptibles para las personas; por ejemplo, el perro puede escuchar sonidos de muy alta frecuencia y el elefante de frecuencia muy baja, en ambos casos imperceptibles para el humano, o el sistema auditivo de los murciélagos, que percibe ondas sonoras que el hombre es incapaz de escuchar.

Estas observaciones nos llevan a pensar hasta qué punto nuestra cosmovisión constituye solo un reflejo de nuestros sentidos y nuestra capacidad de percepción o medición. En este aspecto, el hombre ha construido aparatos que detectan objetos o miden ciertas cantidades que sus sentidos son incapaces de percibir como el telescopio, el microscopio, el radar, el láser de baja frecuencia, etc. Así, el hombre ha construido telescopios que son sensibles tanto a la luz ultravioleta como a la infrarroja; con los primeros se ha logrado observar nubes de gas que contienen estrellas recientemente formadas más masivas que el Sol y que brillan intensamente, mientras que con los últimos se ha obtenido información acerca de las guarderías estelares más calientes del Universo; estos entes no los podríamos ver con ayuda de telescopios que solo son sensibles a la luz visible para el ser humano.

La misma situación podría tomar lugar con respecto a las dimensiones del Universo que nos rodea. En la actualidad pensamos que solo existen tres dimensiones espaciales porque son las que podemos percibir al movernos en el espacio. Asimismo, clásicamente consideramos que existe un solo tiempo en el que tienen lugar todos los fenómenos, incluyendo nuestras vidas, y que éste marca el principio y el fin de la evolución de las cosas. Sin embargo, si viajamos al micro o al macromundo la situación puede cambiar drásticamente, pues nuestros sentidos son incapaces de percibir a distancias muy pequeñas o muy grandes. Lo mismo sucede con las escalas de tiempo demasiado pequeñas, como la de ciertos procesos subatómicos, o extremadamente grandes como la de algunos procesos cosmológicos. Es posible que las dimensiones extra estén escondidas ya sea en escalas muy pequeñas o grandes tanto del espacio como del tiempo. En realidad, los experimentos relativistas realizados hasta el momento tanto en el marco de la física de altas energías como de la gravedad, también nos convencen de que vivimos en un espaciotiempo de cuatro dimensiones no compactas: tres espaciales y una temporal. Sin embargo, aún existen varios problemas abiertos en la física moderna que esperan una solución. En este sentido, las investigaciones de modelos con espaciotiempos que incluyen dimensiones extra no compactas representan una alternativa bastante atractiva para resolverlos.

De este modo, últimamente se han formulado propuestas multidimensionales para abordar problemas físicos actuales como el de la jerarquía de masas, el de la constante cosmológica, el de la materia y la energía oscuras, el de la unificación de la gravedad con campos de materia, el de la evolución consistente de nuestro Universo, entre otros. No obstante, uno de los problemas de estas teorías es que, ciertamente, la materia del Modelo Estándar no puede propagarse grandes distancias en las dimensiones extra sin entrar en conflicto con las observaciones experimentales obtenidas en nuestro mundo tetradimensional. Los resultados de algunas investigaciones muestran que esto se puede evitar si confinamos los campos del Modelo Estándar a vivir en un subespacio (del espacio multidimensional) de cuatro dimensiones, tres espaciales y una temporal, describiendo de esta manera un espaciotiempo similar al nuestro que, a su vez, se encuentra inmerso en un espacio con dimensiones extra; mientras tanto la gravedad necesariamente tiene que propagarse en todas las dimensiones, pues describe la dinámica del espaciotiempo mismo.

La existencia de dimensiones adicionales a las cuatro del espaciotiempo que conocemos inmediatamente da origen a muchas cuestiones como las siguientes: ¿por qué no podemos verlas o detectarlas?, ¿qué tan limitados son nuestros sentidos y/o métodos de percepción de la realidad?, ¿cuántas dimensiones espaciales existen?, ¿cuántos tiempos?, ¿son compactas o extendidas?, ¿su naturaleza es espacial o temporal?, ¿cuál es la topología del espacio extradimensional?, ¿cuál es la estructura del espectro de fluctuaciones gravitatorias y/o partículas en un mundo con dimensiones adicionales?, ¿pueden existir los universos paralelos?, ¿se puede plantear un experimento que nos ayude a entender mejor estas cuestiones?, ¿hay fuerzas extradimensionales?, ¿cómo modifican las leyes tetradimensionales que observamos y medimos en nuestro mundo como las leyes de Newton y Coulomb?, ¿cómo podemos detectar efectos de las dimensiones superiores?, ¿pueden las dimensiones extra ayudarnos a resolver los problemas actuales de la física moderna?, etc.

El éxito de los modelos que contemplan la existencia de dimensiones extra, mejor conocidos en la literatura especializada como mundos membrana, y la posibilidad de tener evidencia experimental de la solución de los problemas mencionados con anterioridad, han motivado varias generalizaciones de los trabajos pioneros en esta área, mismos que consideraron que nuestro universo constituye una membrana delgada (sin anchura a lo largo de las dimensiones adicionales) inmersa en espaciotiempos con más dimensiones. En este sentido, las investigaciones y resultados que presentaremos en este trabajo constituyen una generalización más realista de dichos modelos, pues postulan que nuestro mundo representa una membrana gruesa (con cierto ancho) y se encuentra en expansión acelerada, es decir, un modelo en el que se puede tener acceso a las dimensiones extra por pequeñas que éstas sean y que además puede describir los periodos inflacionarios por los que ha transcurrido la evolución de nuestro Universo (véanse los artículos científicos [1]-[7] v su respectiva bibliografía). Es importante señalar que el hecho de que nuestro Universo constituya una membrana delgada implica que vivimos en una singularidad desnuda del espaciotiempo multidimensional, hecho que carece completamente de sentido desde el punto de vista de la teoría de la gravedad. Por esta razón, es imprescindible proponer modelos que describan nuestro Universo como una membrana gruesa inmersa en un mundo con más dimensiones donde no se tengan singularidades desnudas en absoluto. No obstante, este no es un problema trivial como podría pensarse, pues con frecuencia este tipo de singularidades aparece de una u otra manera, inclusive en los modelos en los que se introduce un campo escalar que tiene acceso a las dimensiones extra con la idea de regularizar las singularidades antes mencionadas.

De este modo, la finalidad del presente trabajo consiste en construir membranas anchas regulares (sin singularidades desnudas en la región donde están colocadas) en expansión en las que se pueda localizar la gravedad y el electromagnetismo tetradimensionales que observamos; en otras palabras, membranas gruesas en expansión en las que se puedan recuperar tanto la ley de la gravitación universal de Newton como la ley de Coulomb que medimos en el mundo que nos rodea y podamos calcular analíticamente y estimar las correcciones provenientes de las dimensiones adicionales con la finalidad de ver si estas se pueden detectar experimentalmente. Asimismo, puesto que estas membranas describen mundos en expansión, en el marco de este paradigma intentaremos describir, por lo menos cualitativamente, las etapas inflacionarias de nuestro Universo (la inflación temprana y la expansión acelerada que experimentamos hoy en día), así como otros efectos cosmológicos interesantes entre los que se encuentran la isotropización del Universo temprano y la descripción de un mecanismo dinámico de reducción dimensional que nos permita obtener tres dimensiones que experimentan una expansión acelerada (como sucede en nuestro Universo) a partir de un mundo multidimensional anisotrópico. Por simplicidad, consideraremos membranas inmersas en un espaciotiempo pentadimensional, es decir, modelos con una sola dimensión extra.

3 El modelo

El método que usualmente se emplea en la construcción de este tipo de modelos consiste en considerar una teoría de campo pentadimensional dada por una acción, aplicar el método variacional para obtener las ecuaciones de Einstein y de los campos involucrados (escalares vectoriales, gravitatorios, fermiónicos, etc.), postular un ansatz idóneo para la métrica pentadimensional en expansión (isotrópica y homogénea) y resolver las ecuaciones de campo correspondientes, es decir, hallar una solución exacta para la configuración de campo que representa el modelo. Posteriormente se estudia la dinámica de las fluctuaciones tanto de la métrica de fondo hallada como de los diversos campos de materia en consideración y se analiza la posible existencia de estados ligados que representen los campos que observamos en cuatro dimensiones, a saber, al gravitón tetradimensional y los diferentes campos de materia del Modelo Estándar de partículas elementales. De este modo uno está en posibilidades de recuperar, en el límite correspondiente, la física del mundo que nos rodea, en particular la ley de la gravitación universal de Newton, la ley de Coulomb, así como otros efectos cosmológicos entre los que se encuentra la expansión acelerada de nuestro Universo. Finalmente se estudia la estructura de los espectros de excitaciones masivas de los campos involucrados en el modelo y se calculan (de preferencia analíticamente) las correcciones a la leves tetradimensionales provenientes de la o las dimensiones extra, mismas que están determinadas por los modos masivos antes mencionados.

En el ámbito de la cosmología, la metodología consiste en postular acciones y métricas más complejas que las usadas en el mundo membrana anterior, es decir, se proponen modelos que pueden o no incluir membranas delgadas y/o campos escalares dependientes del tiempo, por un lado, y se postulan elementos de línea anisotrópicos que de alguna manera incluyan uno o varios factores de escala con la finalidad de describir los periodos inflacionarios de la historia de nuestro universo. Resolver las ecuaciones de campo que estos mundos membrana arrojan no es una tarea fácil y hasta el momento solo se han construido contados modelos de manera exacta. Una vez obtenidas las configuraciones de campo exactas se tiene que realizar una interpretación física de dichas soluciones donde se resalten los efectos que el mundo extradimensional tiene sobre la evolución de nuestro Universo.

El modelo que vamos a estudiar consiste de una acción pentadimensional puramente geométrica que describe gravedad con constante cosmológica:

$$S = 2M_*^3 \int d^5x \sqrt{-g} \left(R - 2\Lambda_5\right),\tag{1}$$

donde R es el escalar de curvatura gravitatorio en 5D construido a partir de la métrica g_{MN} (M, N = 0, 1, 2, 3, 5), Λ_5 es la constante cosmológica del bulto y M_* es la constante de acoplamiento gravitacional en 5D (en realidad el factor $2M_*^3$ se puede expresser como $1/(2\kappa_5^2) = 1/(16\pi G_5)$ donde G_5 representa la

constante de Newton en cinco dimensiones).

A partir de esta acción se pueden derivar fácilment las ecuaciones de Einstein con constante cosmológica:

$$R_{MN} - \frac{1}{2}R \ g_{MN} = -\Lambda_5 \ g_{MN}.$$
 (2)

Consideremos el siguiente elemento de línea, pues queremos que las soluciones que obtengamos en 4D correspondan a una métrica de fondo cosmológica espacialmente plana:

$$ds^{2} = g_{MN} dx^{M} dx^{N} = e^{2f(y)} \left[\hat{g}_{\mu\nu}(x) dx^{\mu} dx^{\nu} \right] + dy^{2}$$

= $e^{2f(y)} \left[-dt^{2} + a^{2}(t) (dx_{1}^{2} + dx_{2}^{2} + dx_{3}^{2}) \right] + dy^{2},$ (3)

aquí $e^{2f(y)}$ es el denominado factor de deformación de la métrica y depende únicamente de la coordenada extra, a(t) es el factor de escala de nuestra membrana, $\hat{g}_{\mu\nu}(x)$ denota el tensor métrico en 4D ($\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$), mientras que y representa la coordenada extradimensional.

Después de sustituir el elemento de línea (3) en las ecuaciones de Einstein (2), estas se reducen a

$$f''(y) = \frac{1}{3} \left(\frac{2\dot{a}^2}{a^2} - \frac{5\ddot{a}}{a} \right) e^{-2f(y)}, \tag{4}$$

$$f'^{2}(y) = \frac{1}{6} \left[\left(\frac{5\ddot{a}}{a} + \frac{\dot{a}^{2}}{a^{2}} \right) e^{-2f(y)} - \Lambda_{5} \right],$$
(5)

donde las primas y los puntos denotan derivadas con respecto a la quinta coordenada y y el tiempo t, respectivamente.

La solución exacta de estas ecuaciones determina una configuración de campo para el modelo y en este caso está dada por las siguientes expresiones analíticas para el factor de deformación y el factor de escala:

$$f(y) = \ln\left[\frac{H}{b}\cos(b(y-y_0))\right], \qquad a(t) = e^{Ht}, \qquad (6)$$

donde y_0 es una constante de integración que denota la posición de la membrana, H es la constante de Hubble que describe la expansión acelerada de dicha membrana, mientras que 1/b parametriza su ancho y está relacionada con la constante cosmológica en 5D de la siguiente manera:

$$\Lambda_5 = 6b^2 \tag{7}$$

implicando que la curvatura del espaciotiempo pentadimensional es constante y positiva, es decir, que corresponde a de Sitter en 5D, pues el mundo membrana está modelado solo por gravedad con constante cosmológica.

De este modo, el elemento de línea 5D comprende una métrica tetradimensional inducida tipo de Sitter multiplicada por el factor de deformación $e^{2f(y)}$ y adopta la forma siguiente:

$$ds^{2} = \frac{H^{2}}{b^{2}}\cos^{2}(by)\left[-dt^{2} + e^{2Ht}(dx_{1}^{2} + dx_{2}^{2} + dx_{3}^{2})\right] + dy^{2}.$$
 (8)

Más adelante va a ser conveniente usar la forma conforme de la métrica (8), para obtenerla es necesario realizar la siguiente transformación de la coordenada extra

$$dw = e^{-f(y)} dy, (9)$$

de donde se obtiene la expresión para w en términos de y:

$$w(y) = \int e^{-f(y)} dy = \frac{2}{H} \operatorname{arctanh}\left[\tan\left(\frac{by}{2}\right)\right],\tag{10}$$

donde ahora el rango de w es $-\infty < w < +\infty.$ En este lenguaje el factor de deformación fadopta la expresión

$$f(w) = \ln\left[\frac{H}{b}\operatorname{sech}(Hw)\right],\tag{11}$$

mientras la métrica adquiere la forma conforme:

$$ds^{2} = e^{2f(w)} \left[\hat{g}_{\mu\nu}(x) dx^{\mu} dx^{\nu} + dw^{2} \right]$$

= $\frac{H^{2}}{b^{2}} \operatorname{sech}^{2}(Hw) \left[-dt^{2} + e^{2Ht} \left(dx_{1}^{2} + dx_{2}^{2} + dx_{3}^{2} \right) + dw^{2} \right].$ (12)

Una manera congruente de interpretar físicamente esta solución es la siguiente: tenemos toda una familia de soluciones regulares que representa un universo de Sitter plano tetradimensional (una membrana en expansión) inmersa en un espaciotiempo de Sitter de cinco dimensiones.

Puesto que nuestro Universo se está expandiendo de una forma acelerada, este puede ser descrito por la membrana dS_4 , pues la segunda derivada del factor de escala es positiva definida $\ddot{a} > 0$, hecho que es importante para la cosmología del modelo en consideración. Además, la constante cosmológica efectiva en 4D está relacionada con el parámetro de Hubble de la manera usual, es decir, que $\Lambda_4 = 3H^2$ como veremos más adelante.

De este modo, esta métrica surge como una solución solitónica puramente geométrica generada por la curvatura positiva de las dos constantes cosmológicas Λ_4 y Λ_5 y, por lo tanto, describe la inmersión de una membrana dS_4 en un espaciotiempo dS_5 . Cabe subrayar que este mundo membrana requiere que tanto Λ_4 como Λ_5 sean no triviales, pues al anular cualquiera de ellas la solución pierde su sentido físico.

La métrica (12) se puede expresar en la forma $g_{MN} = e^{2f} \bar{g}_{MN}$, hecho que nos permite calcular el escalar de curvatura pentadimensional R en términos del escalar tetradimensional \bar{R} y el factor de deformación con ayuda de la siguiente fórmula multidimensional

$$R = e^{-2f} \left[\bar{R} - 2(d-1)\bar{g}^{MN} \bar{\bigtriangledown}_M \bar{\bigtriangledown}_N f - (d-2)(d-1)g^{MN} \bar{\bigtriangledown}_M f \bar{\bigtriangledown}_N f \right],$$
(13)

donde d es el número total de dimensiones. De este modo, en nuestro caso se puede separar la acción efectiva tetradimensional de la acción en 5D:

$$S_{ef} \supset \int d^4x \sqrt{-\bar{g}} \left\{ 2M^3 \int_{-\infty}^{\infty} \left[e^{3f} \bar{R} + 4H^2 e^{3f} \left(5 \operatorname{sech}^2(Hw) - 3 \right) - 2e^{5f} \Lambda_5 \right] dw \right\}.$$
(14)

Una vez que se ha integrado esta acción con respecto a la quinta dimensión, uno debe comparar el resultado con la forma canónica de la acción de Einstein-Hilbert en cuatro dimensiones, es decir, con la acción sobre la membrana

$$S_{membrana} = 2M_{pl}^2 \int d^4x \sqrt{-^4g} \left({}^4R - 2\Lambda_4 \right). \tag{15}$$

Esta comparación nos permite derivar la escala de interacciones gravitacionales tetradimensionales enfocando nuestra atención en el término de curvatura:

$$M_{Pl}^{2} = M^{3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{3f(w)} dw = \frac{M^{3}H^{3}}{b^{3}} \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^{3}(Hw) dw = \frac{\pi M^{3}H^{2}}{2b^{3}} = \frac{3\sqrt{6}\pi M^{3}H^{2}}{\Lambda_{5}^{3/2}}.$$
(16)

Esta es una magnitud finita, tal y como debe ser para toda teoría de campo bien definida en cuatro dimensiones.

El segundo y tercer términos de la integral (14) contribuyen a la definición de la constante cosmológica en 4D:

$$4M_{pl}^2\Lambda_4 = \int_{-\infty}^{\infty} \left[8M^3 H^2 e^{3f} \left(3 - 5\mathrm{sech}^2(Hw) \right) + 4M^3 e^{5f} \Lambda_5 \right] dw.$$
(17)

Después de integrar con respecto a la dimensión extra y simplificar la expresión resultante obtenemos

$$\Lambda_4 = 3H^2. \tag{18}$$

Una característica interesante de este modelo radica en que al poseer dos parámetros libres en la solución, $b \ y \ H$, la constante cosmológica tetradimensional es completamente independiente de la pentadimensional (véanse las fórmulas (7) y (18) que las definen). De este modo, Λ_4 se puede hacer tan pequeña como uno desee, mientras la constante cosmológica en 5D, así como otras propiedades geométricas del modelo, permanecen invariantes.

Ahora analicemos si la gravedad de nuestro mundo tetradimensional se puede recuperar a partir de la solución obtenida en cinco dimensiones (a este aspecto del modelo se le conoce como localización de la gravedad) y si este modelo es estable bajo pequeñas perturbaciones de la métrica.

Con este fin primero se perturba la métrica de fondo (12) en la denominada norma axial $h_{5M} = 0$

$$ds^{2} = e^{2f(y)} \left[g_{\mu\nu} + h_{\mu\nu}(x^{\rho}, y) \right] dx^{\mu} dx^{\nu} + dy^{2}.$$
 (19)

Posteriormente se calculan las ecuaciones de Einstein a primer orden, es decir linealizadas, y se estudia la dinámica de dichas fluctuaciones tensoriales $h_{\mu\nu}(x^{\rho}, y)$ de la métrica de fondo con el objeto de obtener un modo tensorial normalizable sin masa y espín 2 que pueda ser interpretado físicamente como un gravitón tetradimensional estable.

Al seguir esta línea de razonamiento nos vamos a limitar a estudiar solo los modos transversos de traza nula $\bar{h}_{\mu\nu}$ que satisfacen las siguientes condiciones $\bar{h}^{\mu}_{\mu} = \partial^{\mu}\bar{h}_{\mu\nu} = 0$; si además realizamos el cambio de coordenadas (9) y proponemos el siguiente ansatz para la separación de variables

$$\bar{h}_{\mu\nu} = C_{\mu\nu} e^{-\frac{3}{2}f(w)} \Psi(w) g(x)$$
(20)

donde $C_{\mu\nu}$ son constantes arbitrarias, entonces las ecuaciones de Einstein linealizadas se descomponen en una ecuación tetradimensional y otra extradimensional, es decir, una ecuación que describe el perfil del gravitón a lo largo de la dimensión adicional.

De este modo, la ecuación relevante en cuatro dimensiones está dada por

$$\left(-\partial_t^2 - 3H\partial_t + e^{-2Ht}\nabla^2 - 2H^2\right)g(x) = -m^2g(x),\tag{21}$$

donde la constante de integración m^2 se define como la masa de los modos excitados de Kaluza-Klein que un observador mide en un espaciotiempo de Sitter en cuatro dimensiones.

Por otro lado, la ecuación que describe el perfil extradimensional del gravitón adopta la forma de la ecuación de Schrödinger:

$$\left(-\partial_w^2 + \frac{9}{4}f'^2 + \frac{3}{2}f'' - m^2\right)\Psi(w) = 0,$$
(22)

donde uno puede fácilmente identificar el potencial mecánico cuántico V_{QM} de la siguiente manera

$$V_{QM} = \frac{9}{4}f^{\prime 2} + \frac{3}{2}f^{\prime\prime} = \frac{9}{4}H^2 - \frac{15}{4}H^2 \operatorname{sech}^2(Hw)$$
(23)

y ver con claridad que su forma está determinada completamente por la curvatura del espacio tiempo en cinco dimensiones. En la última igualdad se ha hecho uso de la expresión (11) para el factor de deformación, hecho que transforma V_{QM} en un potencial modificado de Pöschl–Teller. Esta forma del potencial mecánico cuántico asegura la existencia de un salto en el espectro de masas (mass gap) entre el estado base (sin masa) y el primer estado excitado masivo, pues su valor asintótico es definido positivo y está dado por $\frac{9}{4}H^2$, o equivalentemente, por $m = \frac{3H}{2}$.

Esta es la forma en la que se obtiene un problema clásico de valores propios para la ecuación de Schrödinger (22) con el potencial modificado de Pöschl–Teller (23) al estudiar la dinámica de las fluctuaciones métricas linealizadas. De manera curiosa, esta ecuación se puede resolver analíticamente y su solución general está dada por

$$\Psi(w) = C_1 P_{\frac{3}{2}}^{\mu} (\tanh(Hw)) + C_2 Q_{\frac{3}{2}}^{\mu} (\tanh(Hw))$$
(24)

donde C_1 y C_2 son constantes de integración arbitrarias, $P_{\frac{3}{2}}^{\mu}$ y $Q_{\frac{3}{2}}^{\mu}$ son funciones asociadas de Legendre de primera y segunda clase, respectivamente, de grado $\nu = 3/2$ y orden $\mu = \sqrt{\frac{9}{4} - \frac{m^2}{H^2}}$. Esta solución posee dos estados discretos: el primero corresponde a un

Esta solución posee dos estados discretos: el primero corresponde a un estado ligado sin masa, con energía $E_0 = -\frac{9}{4}H^2$ y $\mu = 3/2$

$$\Psi_0(w) = k_0 \operatorname{sech}^{\frac{3}{2}}(Hw), \qquad k_0 = \operatorname{const.}$$
(25)

físicamente interpretable como un gravitón renormalizable localizado en la membrana (esta es una condición necesaria para que la gravedad tetradimensional se pueda describir correctamente en el marco de nuestro modelo); el segundo estado corresponde a una excitación masiva con $m_1^2 = 2H^2$, energía $E_1 = -\frac{1}{4}H^2$ y $\mu = \frac{1}{2}$

$$\Psi_1(w) = k_1 \sinh(Hw) \operatorname{sech}^{\frac{3}{2}}(Hw), \qquad k_1 = \operatorname{const.}$$
(26)

y representa un gravitón masivo que también está localizado sobre la membrana; finalmente se tiene todo un continuo de modos masivos a partir de $m \geq \frac{3H}{2}$ descritos por las siguientes funciones propias con orden imaginario $\mu = i\rho$

$$\Psi_m(w) = C_1 P_{\frac{3}{2}}^{\pm i\rho} \left(\tanh(Hw) \right) + C_2 Q_{\frac{3}{2}}^{\pm i\rho} \left(\tanh(Hw) \right), \qquad (27)$$

donde $\rho = \sqrt{\frac{m^2}{H^2} - \frac{9}{4}}$, que as intóticamente se comportan como ondas planas:

$$\Psi^{\mu}_{\pm}(w) = \sum_{+,-} C_{\pm} P^{\pm i\rho}_{\frac{3}{2}} \left(\tanh(Hw) \right) \sim \sum_{+,-} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm iH\rho w}$$
(28)

de acuerdo con lo que uno esperaría en un escenario mecánico cuántico. Es útil señalar que al realizar este último cálculo se ha considerado que 2m > 3Hy $C_2 = 0$ en la ecuación (27).

Este resultado nos prepara el camino para ver cómo la ley de Newton se ve corregida por efectos multidimensionales, puesto que son precisamente estas excitaciones masivas de Kaluza-Klein las que contribuyen a la ley de la gravitación universal con pequeñas correcciones provenientes de la dimensión extra.

Ahora tomemos el límite de membranas delgadas H >> 1 y coloquemos dos partículas de prueba, una con masa M_1 y otra con masa M_2 , en la dirección transversa a la quinta dimensión. Resulta que en el límite newtoniano las correcciones al potencial gravitatorio pueden expresarse de la siguiente manera

$$U(r) \sim \frac{M_1 M_2}{r} \left(G_4 + M_*^{-3} e^{-m_1 r} |\Psi_1(w_0)|^2 + M_*^{-3} \int_{m_0}^{\infty} dm e^{-mr} |\Psi^{\mu(m)}(w_0)|^2 \right) = \frac{M_1 M_2}{r} \left(G_4 + \Delta G_4 \right),$$
(29)

donde la membrana está localizada en $w = w_0$, G_4 es la constante de acoplamiento gravitacional en cuatro dimensiones, $\Psi_1(z_0)$ es la función de

onda del primer estado excitado y puesto que es una función impar, no contribuye de forma alguna en el límite de membranas delgadas que estamos considerando, finalmente $\Psi^{\mu}(w_0)$ representa el continuo de estados masivos que necesitan ser integrados sobre sus masas.

De este modo, las correcciones a la ley de Newton adoptan la siguiente forma:

$$\Delta G_4 \sim M_*^{-3} \frac{1}{\left|\Gamma(-\frac{1}{4})\Gamma(\frac{7}{4})\right|^2} \frac{e^{-\frac{3}{2}Hr}}{Hr} \left(1 + O\left(\frac{1}{Hr}\right)\right), \tag{30}$$

indicando su carácter despreciable, pues decaen exponencialmente debido a la presencia del salto en el espectro de masas de las excitaciones de Kaluza-Klein del gravitón multidimensional. Esta serie de resultados muestra que la gravedad tetradimensional se puede describir correctamente en nuestro mundo membrana en expansión, requerimiento que todo modelo extradimensional debe satisfacer para poder ser considerado como realista.

De una forma similar, se puede demostrar que nuestro mundo membrana suave admite la localización de campos de norma vectoriales que en particular describen el electromagnetismo que observamos en nuestro mundo (esta es una peculiaridad que no está presente en los modelos tipo Randall–Sundrum).

Consideremos la acción pentadimensional para el campo vectorial

$$S_1 = -\frac{1}{4} \int d^5 x \sqrt{-g} \ g^{MN} g^{RS} F_{MR} F_{NS}, \tag{31}$$

donde $F_{MN} = \partial_M A_N - \partial_N A_M$. Las ecuaciones de campo que se derivan de esta acción son

$$\frac{1}{\sqrt{-g}}\partial_M\left(\sqrt{-g}g^{MN}g^{RS}F_{NS}\right) = 0.$$
(32)

Con ayuda de la métrica de fondo (12), las ecuaciones de campo se pueden expresar del modo siguiente

$$\frac{1}{\sqrt{-\hat{g}}}\partial_{\nu}\left(\sqrt{-\hat{g}}\ \hat{g}^{\nu\rho}\hat{g}^{\mu\lambda}F_{\rho\lambda}\right) + \hat{g}^{\mu\lambda}e^{-f}\partial_{w}\left(e^{f}F_{5\lambda}\right) = 0,\tag{33}$$

$$\partial_{\mu} \left(\sqrt{-\hat{g}} \ \hat{g}^{\mu\nu} F_{\nu 5} \right) = 0. \tag{34}$$

Elijamos la condición de norma $A_5 = 0$ haciendo uso de la libertad que tenemos. De este modo, la acción (31) adopta la forma

$$S_1 = -\frac{1}{4} \int d^5 x \sqrt{-g} \Big\{ g^{\mu\alpha} g^{\nu\beta} F_{\mu\nu} F_{\alpha\beta} + 2e^{-2f} g^{\mu\nu} \partial_w A_\mu \partial_w A_\nu \Big\}.$$
(35)

Si a continuación hacemos uso de la siguiente descomposición de Kaluza-Klein para el campo de norma A_{μ}

$$A_{\mu}(x^{\lambda}, w) = \sum_{n} a_{\mu}^{(n)}(x^{\lambda})\rho_{n}(w)e^{-f/2}$$
(36)

y exigimos que se satisfagan las condiciones de ortonormalización para las funciones $\rho_n(w)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_m(w)\rho_n(w)dw = \delta_{mn},$$
(37)

la acción (35) se transforma en (salvo términos de frontera)

$$S_{1} = \sum_{n} \int d^{4}x \sqrt{-\hat{g}} \left(-\frac{1}{4} \hat{g}^{\mu\alpha} \hat{g}^{\nu\beta} f^{(n)}_{\mu\nu} f^{(n)}_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} m_{n}^{2} \hat{g}^{\mu\nu} a^{(n)}_{\mu} a^{(n)}_{\nu} \right),$$
(38)

donde ahora $f_{\mu\nu}^{(n)} = \partial_{\mu}a_{\nu}^{(n)} - \partial_{\nu}a_{\mu}^{(n)}$ es el tensor de Faraday tetradimensional y m_n define la masa del campo de norma en cuatro dimensiones $a_{\mu}^{(n)}$.

Por otro lado, haciendo uso de (36) y la definición de la masa tetradimensional m_n del campo vectorial $a^{(n)}_{\mu}$, la ecuación (33) se transforma en una ecuación de Schrödinger para los modos vectoriales de Kaluza-Klein $\rho_n(w)$ en la dimensión extra

$$\left[-\partial_w^2 + V_1(w)\right]\rho_n(w) = m_n^2\rho_n(w),\tag{39}$$

donde ahora el potencial mecánimo cuántico $V_1(z)$ está dado por

$$V_1(w) = \frac{1}{2}\partial_w^2 f + \frac{1}{4}\left(\partial_w f\right)^2 = \frac{H^2}{4} - \frac{3H^2}{4}\operatorname{sech}^2(Hw).$$
(40)

Aquí se debe señalar que la ecuación de campo restante (34) nos proporciona la condición de norma de Lorentz para el vector de norma en cuatro dimensiones $a_{\mu}^{(n)}$.

El potencial (40) también tiende asintóticamente a un valor positivo definido $H^2/4$, hecho que asegura la presencia de un salto en el espectro de masas de los modos vectoriales de Kaluza-Klein. De esta forma, al tomar en cuenta la expresión del factor de deformación (11), la ecuación (39) también se convierte en una ecuación de Schrödinger con un potencial de Pöschl-Teller modificado:

$$\left[-\partial_w^2 - \frac{3H^2}{4}\operatorname{sech}^2(Hw)\right]\rho_n = E_n\rho_n,\tag{41}$$

donde $E_n = m_n^2 - \frac{H^2}{4}$. El espectro de energía de los estados ligados se puede expresar del siguiente modo

$$E_n = -H^2 \left(\frac{1}{2} - n\right)^2 \tag{42}$$

o en términos del cuadrado de la masa:

$$m_n^2 = n(1-n)H^2.$$
 (43)

Puesto que n es un entero que debe satisfacer la desigualdad $0 \le n < \frac{1}{2}$, entonces hay un solo estado ligado (el estado base), es decir, el modo cero sin masa $(m_0^2 = 0)$ y normalizado

$$\rho_0(w) = \sqrt{\frac{H}{\pi} \operatorname{sech}(Hw)},\tag{44}$$

hecho que implica que el modo cero del campo de norma se localiza sobre la membrana.

Asimismo, a partir del salto en el espectro de masas definido por $m^2 = H^2/4$, los modos continuos están dados por funciones asociadas de Legendre de primera clase, grado $\nu = 1/2$ y orden puramente imaginario $\mu = i\beta = i\sqrt{m^2/H^2 - 1/4}$:

$$\rho_n(w) = C_+(\beta) P_{1/2}^{+i\beta} \left(\tanh(Hw) \right) + C_-(\beta) P_{1/2}^{-i\beta} \left(\tanh(Hw) \right), \quad (45)$$

donde ahora $C_{\pm}(\beta)$ son funciones arbitrarias que dependen de β . Esta expresión de la solución general se debe a que las funciones asociadas de Legendre de primera y segunda clase son linealmente independientes, no obstante, existe la siguiente relación entre ellas

$$Q^{\mu}_{\nu}(x) = \frac{\pi}{2\sin(\pi\mu)} \left[P^{\mu}_{\nu}(x)\cos(\pi\mu) - \frac{\Gamma(\nu+\mu+1)}{\Gamma(\nu-\mu+1)} P^{-\mu}_{\nu}(x) \right].$$
(46)

De esta manera es más evidente cómo la solución general (45) se comporta asintóticamente como ondas planas

$$P_{1/2}^{\pm i\beta} \left(\tanh(Hw) \right) \sim \frac{e^{\pm i\beta Hw}}{\Gamma\left(1 \mp i\beta\right)}.$$
(47)

Del mismo modo que en el caso gravitatorio, estas expresiones van a ser de extrema utilidad cuando se calculen las correcciones a la ley de Coulomb provenientes de los modos masivos extradimensionales del campo de norma.

Ahora consideremos la interacción de dos fermiones con un campo de norma en el mundo membrana pentadimensional estudiado con antelación con la finalidad de calcular las correcciones de naturaleza multidimensional a la ley de Coulomb en cuatro dimensiones:

$$S_I = \int d^4x dw \ \sqrt{-g} \ (-e_5) \bar{\Psi}(x,w) \Gamma^M A_M(x,w) \Psi(x,w), \tag{48}$$

donde e_5 es una constante de acoplamiento en 5D. Aquí se debe señalar que vamos a considerar que el fermión tetradimensional con quiralidad izquierda corresponde a un modo cero sin masa del fermión pentadimensional.

De esta forma, después de llevar a cabo la reducción dimensional de esta acción, todos los modos vectoriales de Kaluza-Klein van a interactuar con el modo cero del fermión tetradimensional sin masa $L_0(w)$ que está localizado sobre la membrana:

$$S_{I} \supset \int_{n} \int d^{4}x dw \sqrt{-\hat{g}} e^{5f}(-e_{5}) e^{-2f} \bar{\psi}_{0}(x) L_{0} e^{-f} \gamma^{\mu} a_{\mu}^{(n)}(x) e^{-f/2} \rho_{n}(w) e^{-2f} \psi_{0}(x) L_{0}$$

$$= (-e_{5}) \int_{n} \int dw e^{-f/2} \rho_{n}(w) L_{0}^{2}(w) \int d^{4}x \sqrt{-\hat{g}} \bar{\psi}_{0}(x) \gamma^{\mu} a_{\mu}^{(n)}(x) \psi_{0}(x)$$

$$= \int d^{4}x \sqrt{-\hat{g}} \left\{ -e \bar{\psi}_{0}(x) \gamma^{\mu} a_{\mu}^{(0)}(x) \psi_{0}(x) - \int_{n}^{\infty} \epsilon_{n} \bar{\psi}_{0}(x) \gamma^{\mu} a_{\mu}^{(n)}(x) \psi_{0}(x) \right\}, \quad (49)$$

donde al tomar en cuenta la igualdad (44) obtenemos la siguiente expresión para la carga tetradimensional del fermión atrapado en la membrana

$$e = e_5 \int dw \, e^{-f/2} \, \rho_0(w) L_0^2(w) = e_5 \sqrt{\frac{b}{\pi}} \int dw \, L_0^2(w) = e_5 \sqrt{\frac{b}{\pi}},$$

mientras que por ϵ_n se denotan los acoplamientos efectivos en cuatro dimensiones

$$\epsilon_n \equiv e_5 \int dw \, \mathrm{e}^{-f/2} \, \rho_n(w) L_0^2(w) = e \sqrt{\frac{\pi}{b}} \int dw \, \mathrm{e}^{-f/2} \, \rho_n(w) L_0^2(w), \qquad (50)$$

con los $\rho_n(w)$ dados por la solución (45) a la ecuación de Schrödinger (39) y \sum_n representa una suma o integración (o ambas) con respecto a *n*, dependiendo del carácter discreto o continuo (o mixto) de los campos de norma $a^{(n)}_{\mu}(x)$ y de los acoplamientos $\epsilon_n(w)$, donde estos últimos están determinados por $\rho_n(w)$.

En el límite no relativista, el potencial de Coulomb entre dos fermiones cargados que intercambian un fotón de Kaluza-Klein está dado por

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi r} + \int_{m_0}^{\infty} dm \frac{\epsilon_n^2}{4\pi r} e^{-mr}$$

= $\frac{e^2}{4\pi r} \left[1 + \frac{\pi}{b} \int_{m_0}^{\infty} dm \ e^{-mr} \left(\int dw \ e^{-f(w)/2} \ \rho_n(w) L_0^2(w) \right)^2 \right], (51)$

donde $m_0 = H/2$ es el primer estado excitado masivo. De este modo, el potencial de Coulomb y sus correcciones provienen del modo cero y de los modos masivos de Kaluza-Klein del campo vectorial, respectivamente.

Para calcular los acoplamientos efectivos tetradimensionales ϵ_n es necesario hacer uso del modo cero del fermión izquierdo localizado en la membrana dado por

$$L_0(w) = \left[\frac{H \ \Gamma\left(\frac{b+2M}{2b}\right)}{\sqrt{\pi} \ \Gamma\left(\frac{M}{b}\right)}\right]^{\frac{1}{2}} \operatorname{sech}^{\frac{M}{b}}(Hw),$$
(52)

donde M es la masa pentadimensional del fermión. Al sustituir el factor de deformación (11) y la expresión (45) para las funciones ρ_n en (50) obtenemos

$$\epsilon_{n} = e\sqrt{H} \frac{\Gamma\left(\frac{2M+b}{2b}\right)}{\Gamma\left(\frac{M}{b}\right)} \int dw \operatorname{sech}^{\frac{4M-b}{2b}}(Hw) \left[\sum_{\pm} C_{\pm}(\beta) P_{1/2}^{\pm i\beta}(\tanh(Hw))\right]$$
$$= e\sqrt{\frac{\pi}{H}} \frac{\Gamma\left(\frac{2M+b}{2b}\right)}{\Gamma\left(\frac{M}{b}\right)} \frac{\Gamma\left(\frac{4M-b}{4b}\right)}{\Gamma\left(\frac{4M+b}{4b}\right)} \left[\sum_{\pm} C_{\pm}(\beta) P_{1/2}^{\pm i\beta}(0)\right],$$
(53)

donde $\beta = \sqrt{\frac{m^2}{H^2} - \frac{1}{4}}$, y además hemos hecho uso de la siguiente definición de la función delta¹ correspondiente al límite de membrana delgada H >> 1:

$$\delta(w) = \lim_{H \to \infty} \frac{H\Gamma\left(\frac{4M+b}{4b}\right)}{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{4M-b}{4b}\right)} \operatorname{sech}^{\frac{4M-b}{2b}}(Hw), \qquad 4M > b.$$
(54)

¹Es realmente fácil corroborar que esta definición posee todas las propiedades de la función de distribución delta normalizada a la unidad.

Entonces el potencial de Coulomb se expresa como

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi r} \left[1 + \frac{\pi}{H} \left(\frac{\Gamma\left(\frac{2M+b}{2b}\right)}{\Gamma\left(\frac{M}{b}\right)} \frac{\Gamma\left(\frac{4M-b}{4b}\right)}{\Gamma\left(\frac{4M+b}{4b}\right)} \right)^2 \int_{m_0}^{\infty} dm \, \mathrm{e}^{-mr} \left| \sum_{\pm} C_{\pm}(\beta) P_{1/2}^{\pm i\beta}(0) \right|^2 \right] = \frac{e^2}{4\pi r} \left[1 + \frac{2\pi}{H} \left(\frac{\Gamma\left(\frac{2M+b}{2b}\right)}{\Gamma\left(\frac{M}{b}\right)} \frac{\Gamma\left(\frac{4M-b}{4b}\right)}{\Gamma\left(\frac{4M+b}{4b}\right)} \right)^2 \int_{m_0}^{\infty} dm \, \mathrm{e}^{-mr} \left| \frac{\Gamma\left(1+i\beta\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}-\frac{i\beta}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{4}-\frac{i\beta}{2}\right)} \right|^2 \right]. (55)$$

De este modo, el potencial de Coulomb corregido está dado por

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi r} \left[1 + \Delta V\right],\tag{56}$$

donde

$$\Delta V = 2\pi \left[\frac{\Gamma\left(\frac{2M+b}{2b}\right)}{\Gamma\left(\frac{M}{b}\right)} \frac{\Gamma\left(\frac{4M-b}{4b}\right)}{\Gamma\left(\frac{4M+b}{4b}\right)} \right]^2 \frac{1}{\left|\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)\Gamma\left(\frac{5}{4}\right)\right|^2} \frac{e^{-Hr/2}}{Hr} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{Hr}\right)\right).$$
(57)

Una vez más hemos obtenido correcciones que decaen exponencialmente, indicando que estas tienen un carácter muy pequeño. A pesar de que estas correcciones dependen de los parámetros del campo fermiónico y la constante cosmológica en 5D M y b, es interesante tratar de usar las cotas experimentales existentes para la masa del fotón con el fin de analizar la viabilidad del presente modelo.

Ahora consideremos la acción anterior acoplada mínimamente a un campo escalar fantasma $\phi(t, w)$ que depende del tiempo y se puede propagar en el espacio multidimensional

$$S_b = \int d^5 x \sqrt{g} \left[\frac{1}{16\pi G} \left(R - 2\Lambda \right) + \frac{1}{2} \left(\nabla \phi \right)^2 \right], \tag{58}$$

con una métrica anisotrópica del espaciotiempo

$$ds^{2} = e^{2f(w)} \left\{ -dt^{2} + a^{2}(t) \left[e^{u(t,w)} \left(dx^{2} + dy^{2} \right) + e^{-2u(t,w)} dz^{2} \right] + dw^{2} \right\}.$$
 (59)

Las ecuaciones de Einstein y Klein-Gordon correspondientes son más complicadas que las que estudiamos anteriormente, no obstante, estas se pueden resolver de modo exacto, obteniendo la siguiente solución:

$$a(t) = e^{Ht}, \qquad f(w) = \ln\left[\frac{H}{b}\operatorname{sech}\left[H(w - w_0)\right]\right] , \qquad (60)$$

$$\phi(t,w) \sim u(t,w) = \epsilon(t)\chi(w)e^{-\frac{3}{2}f},\tag{61}$$

$$\chi(w) = C_1 P_{3/2}^{\mu} \left[\tanh\left(H(w - w_0)\right) \right] + C_2 Q_{3/2}^{\mu} \left[\tanh\left(H(w - w_0)\right) \right], \quad (62)$$

donde ahora el orden de las funciones asociadas de Legendre $\mu = \sqrt{\frac{9}{4} - \frac{\Omega^2}{H^2}}$ está dado en términos de la constante Ω . Cabe señalar que el campo escalar ϕ es proporcional a la función métrica u: $\phi \sim u$.

La física de este modelo para las fluctuaciones gravitatorias es muy similar a la del modelo anterior (1) y permite localizar la gravedad tetradimensional del mismo modo. No obstante, la novedad de este mundo membrana anisotrópico estriba en que la ecuación que satisface la función temporal $\epsilon(t)$ de u es la del oscilador armónico amortiguado. De este modo, tenemos tres casos diferentes dependiendo de la relación entre Ω y H, pero todos presentan un comportamiento que se desvanece a medida que pasa el tiempo $(u \to 0)$ dejando una métrica isotrópica y homogénea:

a) caso subamortiguado ($\Omega^2 > 9H^2/4$)

$$\epsilon(t) = Ce^{-\frac{3}{2}Ht}\sin\left(\omega t + \delta\right) \tag{63}$$

donde la constante C denota la amplitud de las oscilaciones, el parámetro $\omega = \sqrt{\Omega^2 - \frac{9}{4}H^2}$ es la frecuencia de las oscilaciones sin amortiguación y δ es una fase constante arbitraria.

b) caso amortiguado crítico ($\Omega^2 = 9H^2/4$)

$$\epsilon(t) = e^{-\frac{3}{2}Ht} \left(\alpha t + \beta\right) , \qquad (64)$$

donde α y β son constantes arbitrarias determinadas por las condiciones iniciales.

c) caso sobreamortiguado ($\Omega^2 < 9H^2/4$)

$$\epsilon(t) = e^{-\frac{3}{2}Ht} \left(\alpha e^{\tilde{\omega}t} + \beta e^{-\tilde{\omega}t} \right) , \qquad (65)$$

donde ahora $\tilde{\omega} = \sqrt{\frac{9}{4}H^2 - \Omega^2}.$

Como se puede observar fácilmente, todas estas funciones decaen exponencialmente a cero en el tiempo, hecho que se traduce en la desaparición exponencial de la función métrica $u \to 0$ que, a su vez, transforma la métrica original anisotrópica en una métrica de fondo pentadimensional isotrópica donde la membrana inducida es el espaciotiempo de Sitter tetradimensional, dando lugar a un mecanismo muy natural de isotropización.

Cabe señalar que dicha isotropización toma lugar de forma superexponencial en la métrica para una amplia gama de condiciones iniciales (para todo tiempo inicial arbitrario $t_i > 0$ y cualquier valor de las constantes de integración C, α , β y δ), dando lugar de manera abrupta al surgimiento del mundo membrana (12) estudiado con anterioridad:

$$ds^{2} = e^{2f(w)} \left[-dt^{2} + a^{2}(t) \left(dx^{2} + dy^{2} + dz^{2} \right) + dw^{2} \right].$$

Se debe mencionar que junto con la función u, el campo escalar también desaparece exponencialmente como consecuencia de su proporcionalidad. De manera curiosa, mientras la métrica tetradimensional se isotropiza y el campo escalar desaparece, el espacio pentadimensional so torna más y más anisotrópico con ayuda del tensor no local de Weyl proyectado a la membrana 4D.

Ahora vamos a agregar al modelo una membrana delgada:

$$R_{MN} = \frac{2}{3}g_{MN}\Lambda_5 + 8\pi G_5 \left[-\partial_M \phi \partial_N \phi + \tilde{T}_{MN} + \frac{2}{3}g_{MN}\sigma(\phi, t)\delta(w) \right] , \quad (66)$$

donde $\sigma(\phi, t)$ es la tensión de la membrana que, en general, depende del campo escalar y del tiempo, y

$$\tilde{T}_{MN} = T_{MN} - \frac{1}{3}g_{MN}T_A^A \tag{67}$$

es el tensor de energía-momento de la membrana. También vamos a introducir dos factores de escala $F_1(t)$ y $F_2(t)$ en la métrica e impondremos la simetría de reflexión a lo largo de la quinta dimensión:

$$ds^{2} = e^{2a|w|} \left[dt^{2} - F_{1}^{2}(t)e^{u(t,w)} \left(dx^{2} + dy^{2} \right) - F_{2}^{2}(t)e^{-2u(t,w)}dz^{2} \right] - dw^{2} , \quad (68)$$

donde *a* es una constante. La peculiaridad del modelo (68) radica en que las tres dimensiones espaciales de la membrana pueden evolucionar (expandiéndose o contrayéndose) en el tiempo a través de los factores de escala $F_1(t) \ge F_2(t)$.

La solución completa ahora está dada por:

$$F_1(t) \sim e^{Ht}$$
, $F_2(t) \sim e^{-2Ht}$, (69)

$$u(t,w) = \mathcal{A} \sin(\omega t) e^{-2a|w|} J_2\left(\frac{\omega}{|a|} e^{-a|w|}\right) , \qquad (70)$$

$$\phi(t,w) = \sqrt{\frac{3}{16\pi G}} \left[\mathcal{A} \sin(\omega t) e^{-2a|w|} J_2\left(\frac{\omega}{|a|} e^{-a|w|}\right) + 2Ht \right] , \qquad (71)$$

donde H es una constante, el parámetro a debe ser positivo definido a > 0 y J_2 es una función de Bessel de segundo orden y primera clase. La amplitud del campo escalar fantasma ϕ se incrementa/decrece linealmente con el tiempo dependiendo del signo de la constante H.

De este modo, la métrica adopta la siguiente forma anisotrópica:

$$ds^{2} = e^{2a|w|} \left[dt^{2} - e^{[u(t,w) + Ht]} \left(dx^{2} + dy^{2} \right) - e^{-2[u(t,w) + Ht]} dz^{2} \right] - dw^{2}.$$
 (72)

Es evidente que para valores positivos de la constante de Hubble, la métrica del espaciotiempo se expande en las direcciones $x \in y$, mientras se contrae en la dirección z. Esto significa que para intervalos de tiempo macroscópicos la membrana tridimensional se va a convertir en una membrana bidimensional y solo va a tener de manera efectiva dos dimensiones espaciales. Este resultado se puede generalizar rápidamente a un número arbitrario de dimensiones del espaciotiempo y puede tener aplicaciones en teoría de cuerdas, por ejemplo.

Este efecto se puede ilustrar de manera simple con un cubo de hielo que se derrite bajo la acción del calor: a medida que pasa el tiempo la materia tridimensional abandona el cubo y se va esparciendo (expandiendo) en dos dimensiones, perdiendo el acceso a la tercera dimensión.

Agradecimientos

El autor expresa su agradecimiento al profesorado del ICF, UNAM, especialmente al Prof. Gabriel Germán, por su hospitalidad y agradece al SNI por su apoyo. Asimismo, sus investigaciones fueron financiadas por el proyecto PAPIIT-UNAM No. IN103413-3 Teorías de Kaluza-Klein, inflación y perturbaciones gravitacionales.

Bibliografía

1. A. Herrera-Aguilar, D. Malagón-Morejón and R. R. Mora-Luna, "Localization of gravity on a de Sitter thick braneworld without scalar fields", JHEP **1011** (2010) 015 (1-11), arxiv:1009.1684 [hep-th].

2. G. Germán, A. Herrera-Aguilar, D. Malagón-Morejón, R. R. Mora-Luna and R. da Rocha, "A de Sitter thick braneworld", JCAP **02** (2013) 035 (1-17), arxiv:1210.0721 [hep-th].

3. M. Gogberashvili, A. Herrera-Aguilar, D. Malagón-Morejón, R. R. Mora-Luna and U. Nucamendi, "Thick brane isotropization in the 5D anisotropic standing wave braneworld model", Phys. Rev. **D87** (2013) 084059 (1-8), arXiv:1201.4569[hep-th].

4. H. Guo, A. Herrera-Aguilar, Y.-X. Liu, D. Malagón-Morejón and R. R. Mora-Luna, "Localization of bulk matter fields, the hierarchy problem and corrections to Coulomb's law on a pure de Sitter thick braneworld", Phys. Rev. **D87** (2013) 095011 (1-21), arXiv:1103.2430[hep-th].

5. M. Gogberashvili, A. Herrera-Aguilar, D. Malagón-Morejón and R. R. Mora-Luna, "Anisotropic inflation in a 5D standing wave braneworld and Dimensional Reduction", Phys. Lett. **B725** (2013) 208, arXiv:1202.1608 [hep-th].

6. N. Barbosa-Cendejas, A. Herrera-Aguilar, K. Kanakoglou, U. Nucamendi and I. Quiros, "Mass hierarchy, mass gap and corrections to Newton's law on thick branes with Poincar symmetry", Gen. Rel. Grav. 46 (2014) 1631 (1-26), arXiv:0712.3098 [hep-th].

7. M. Carrillo-González, G. Germán, A. Herrera-Aguilar and D. Malagón-Morejón, "On gravity localization in scalar braneworlds with a superexponential warp factor", Gen. Rel. Grav. **46** (2014) 1657 (1-16), arXiv:1210.0597 [hep-th].

LA FÍSICA DE LAS BARRAS DE ERROR por Guillermo Hinojosa.

Estas notas son parte del manual de experimentos de física que se encuentra en preparación [1]. Son autocontenidas y se pueden entender sin hacer referencia al libro. Una referencia general para el lector interesado es *Evaluating Measurement Accuracy: A Practical Approach* [2].

Cuando la variable de interés se deriva de otras variables que se miden y que tienen una incertidumbre asociada, entonces el valor de esa varible debe tener otra incertidubre o error. Por ejemplo, supongamos que se quiere derivar la temperatura T de un gas ideal del volumen V y la presión P. Estas variables están relacionadas mediante la conocida ecuación:

$$T = \frac{PV}{nR} \tag{1}$$

en donde $n \ge R$ son constantes. En realidad, uno nunca mide $V \ge P$; sino $V \pm \delta V \ge P \pm \delta P$, donde $\delta V \ge \delta P$ son los errores respectivos asociados al hecho de medir. Es razonable pensar que debido a las incertidumbres en la presión y el volúmen debe haber una incertidumbre δT en la temperatura. Se dice que los errores en $V \ge P$ se propagan hacia $T \ge C$ ómo se puede saber el valor de δT propagado a partir de $\delta V \ge \delta P$?.

Se presentan ejemplos de casos simples que ilustran la interpretación de las incertidumbres o errores experimentales. Existe el caso general que no se discutirá en estas notas.

El caso lineal

Supongamos que α depende de β y γ según:

$$\alpha = \beta - \gamma \tag{2}$$

y que tanto β como γ tienen errores $\delta\beta$ y $\delta\gamma$, es decir, los valores reales de β y γ son $\beta \pm \delta\beta$ y $\gamma \pm \delta\gamma$. Es importante tomar en cuenta que estos errores pueden ser sistemáticos o estadísticos. $\delta\alpha$ se interpreta como alguna medida de la dispersión que en general, para el caso de errores estadísticos, se toma como la desviación estándar σ_{α} . Es decir, para efectos de nuestro análisis son equivalentes:

$$\delta \alpha \equiv \sigma_{\alpha} \tag{3}$$

La desviación estándar σ_{α} se puede escribir como

2

$$\sigma_{\alpha}^2 \equiv \langle [\alpha - \overline{\alpha}]^2 \rangle \tag{4}$$

donde $\overline{\alpha}$ representa el valor promedio de todos los valores de α . Sustituyendo el valor de α dado por la ecuación (2) y $\overline{\alpha}$ por $\overline{\beta} - \overline{\gamma}$ en la ecuación 4

$$\sigma_{\alpha}^{2} = \langle [(\beta - \gamma) - (\overline{\beta} - \overline{\gamma})]^{2} \rangle \tag{5}$$

desarrollando el binomio al cuadrado de esta última ecuación

$$\begin{split} \sigma_{\alpha}^{2} &= \langle (\beta - \gamma)^{2} - 2(\beta - \gamma)(\overline{\beta} - \overline{\gamma}) + (\overline{\beta} - \overline{\gamma})^{2} \rangle \\ \sigma_{\alpha}^{2} &= \langle \beta^{2} - 2\beta\overline{\beta} + \overline{\beta}^{2} + \gamma^{2} - 2\gamma\overline{\gamma} + \overline{\gamma}^{2} - 2\beta\gamma + 2\beta\overline{\gamma} + 2\gamma\overline{\beta} - 2\overline{\beta}\overline{\gamma} \rangle \\ \sigma_{\alpha}^{2} &= \langle [\beta - \overline{\beta})]^{2} + \langle [\gamma - \overline{\gamma}]^{2} + -2\beta[\gamma - \overline{\gamma}] + 2\overline{\beta}[\gamma - \overline{\gamma}] \rangle \end{split}$$

agrupando

$$\sigma_{\alpha}^{2} = \langle [\beta - \overline{\beta})]^{2} \rangle + \langle [\gamma - \overline{\gamma}]^{2} \rangle + 2 \langle [\gamma - \overline{\gamma}] [\overline{\beta} - \beta] \rangle$$

que utilizando la definición dada por la ecuación (4) queda

$$\sigma_{\alpha}^{2} = \sigma_{\beta}^{2} + \sigma_{\gamma}^{2} - 2\langle [\gamma - \overline{\gamma}] [\beta - \overline{\beta}] \rangle \tag{6}$$

El último término de esta última ecuación (6), es por definición (en forma equivalente a la ecuación (4):

$$\langle [\gamma - \overline{\gamma}] [\beta - \overline{\beta}] \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\gamma - \overline{\gamma}) (\beta - \overline{\beta})$$
(7)

y se conoce como la *ecuación de correlación* de primer grado. Es una medida de la dependencia entre dos variables, en este caso β y γ . Si las variables **no** están relacionadas¹, entonces se espera que:

$$\langle [\gamma - \overline{\gamma}] [\beta - \overline{\beta}] \rangle = 0 \tag{8}$$

y la ecuación (6) se simplifica a:

¹También se usa el término de variables no correlacionadas.

$$\sigma_{\alpha}^2 = \sigma_{\beta}^2 + \sigma_{\gamma}^2 \tag{9}$$

que es equivalente a:

$$\delta\alpha^2 = \delta\beta^2 + \delta\gamma^2 \tag{10}$$

y establece que el cuadrado del error propagado a una variable es simplemente la suma de los cuadrados de los errores de las otras variables, siempre y cuando no exista relación entre ellas.

En general, el error δf de f para $f = f(x_1, x_2, x_3...x_N)$ donde $\delta x_1, \delta x_2, \delta x_3...\delta x_N$ son los errores asociados a cada una de las variables x_i no correlacionadas está dado por:

$$\delta f = \sqrt{\delta x_1^2 + \delta x_2^2 + \delta x_3^2 + \dots + \delta x_N^2} \tag{11}$$

o en forma compacta,

$$\delta f = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} \delta x_i^2} \tag{12}$$

En algunos libros a la ecuación (11) le llaman la suma de las cuadraturas aunque parece que es un término poco usado. Finalmente, se puede demostrar que si

$$\alpha = \beta + \gamma \tag{13}$$

sus errores también se cumplen las ecuaciones (9) y (10).

Propagación de errores para variables relacionadas por un producto

Otro caso interesante es cuando las varibles están relacionadas por un producto. Digamos que

$$f = x^a y^b \tag{14}$$

el truco consiste en aplicar el logaritmo a la ecuación 14

$$\ln f = a \ln x + b \ln y \tag{15}$$

y después utilizar la teoría para la propagación de errores del caso lineal que acabamos de ver. Según la cual, el cuadrado del error es igual a la suma de los cuadrados de las variables. En este caso las variables son $(a \ln x)$ y $(b \ln y)$:

$$\delta^2(\ln f) = \delta^2(a\ln x) + \delta^2(b\ln y)$$

en donde, podemos interpretar a δ como el operador diferencial:

$$[\delta(\ln f)]^{2} = a^{2} [\delta(\ln x)]^{2} + b^{2} [\delta(\ln y)]^{2}$$
$$[\frac{\delta f}{f}]^{2} = a^{2} [\frac{\delta x}{x}]^{2} + b^{2} [\frac{\delta y}{y}]^{2}$$
(16)

nótese que no importa el signo de a ni b. Si b = -1 la ecuación (14) corresponde a un cociente pero los errores se propagan igual que para un producto con b positivo.

Si se tiene un conjunto de valores $\{x_i, y_i\}$ experimentales en donde se sabe que las incertidumbres de x_i e y_i siempre son δx y δy , entonces la ecuación (16) se puede escribir:

$$\left[\frac{\delta f_i}{f_i}\right]^2 = a^2 \left[\frac{\delta x}{x_i}\right]^2 + b^2 \left[\frac{\delta y}{y_i}\right]^2 \tag{17}$$

Lo que significa que el error es multivaluado, es decir, que δf_i tiene muchos valores porque es una función de $x_i \in y_i$. Cuando f es una función monótona y bien comportada de $x_i \in y_i$; y las condiciones experimentales lo permiten se puede aproximar a que δf sea univaluada en un cierto intervalo haciendo uso de \overline{x} y de \overline{y} :

$$\left[\frac{\delta f}{\overline{f}}\right]^2 = a^2 \left[\frac{\delta x}{\overline{x}}\right]^2 + b^2 \left[\frac{\delta y}{\overline{y}}\right]^2 \tag{18}$$

lo que implica que f no cambia mucho en el intervalo de interés: $f_i \approx \overline{f}$, $x_i \approx \overline{x}$ y $y_i \approx \overline{y}$ para $\forall f_i$ y $\forall \{x_i, y_i\}$. Despejando \overline{f} de la ecuación (18) se obtiene una expresión práctica:

$$\delta f = \sqrt{a^2 \left[\frac{\delta x}{\overline{x}}\right]^2 + b^2 \left[\frac{\delta y}{\overline{y}}\right]^2} \tag{19}$$

En conclusión, con un análisis sorprendemente sencillo se puede entender como una variación de un parámetro puede propagar un variación hacia otra
variable. Esto se puede aplicar para estudiar el diseño de un experimento o para tener una idea general de como afecta la incertidumbre de una medición a un experimento.

Referencias

- [1] Manual de experimentación para la carrera de física por Guillermo Hinojosa, será editado por la UNAM.
- [2] Evaluating Measurement Accuracy: A Practical Approach por Semyon G. Rabinovich, Editorial Springer, Diciembre, 2009.

Control de estados cuánticos de radiación y de materia

R. Jáuregui

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 70-543, Distrito Federal, 04510, México e-amil : rocio@fisica.unam.mx

1. Introducción.

Cuando hace casi un siglo, se concibió la mecánica cuántica, sus principales desarrolladores comprendieron que la visión humana del universo adquiría aspectos nunca imaginados. Erwin Schrdinger escribía en 1935 que en el laboratorio jamás se estudiarían sistemas cuánticos individuales, y que por tanto las conclusiones aparentemente absurdas que resultaban de la descripción cuántica de sistemas individuales no eran observables. Como normalmente ocurre en ciencia, ésta y otras afirmaciones debían ser puestas a prueba. Desde los comienzos de la mecánica cuántica se han desarrollado las técnicas (teóricas y experimentales) para probar sus fundamentos a través de la realización de experimentos que en su concepción se pensaron como irrealizables (experimentos mentales). Durante la segunda mitad del siglo pasado, avances tecnológicos impulsados por retos ciéntificos cada vez más ambiciosos, permitieron obtener un control extraordinario de sistemas cuánticos elementales tales como átomos y cuantos de luz (fotones). La caracterización del estado cuántico de sistemas individuales y los efectos que sobre este estado ejerce su entorno es en la actualidad una de las áreas de mayor desarrollo en Física. No solo se ha comprobado la existencia de correlaciones cuánticas en los grados de libertad internos de estos sistemas elementales sino también se ha dado inicio a un estudio amplio de los efectos de las correlaciones cuánticas de estos sistemas con su entorno. Estos estudios han dado pie a el aprovechamiento de la física cuántica para el desarrollo de protocolos específicos (ingeniería cuántica) como, por ejemplo, la generación, codificación, transmisión y lectura de información (información cuántica). Simultáneamente se ha incrementado nuestro conocimiento acerca de los mecanismos naturales que enmascaran a las correlaciones cuánticas rompiendo la barrera de la física cuántica hacia las física clásica.

En este escrito se ilustran brevemente algunas de las herramientas teóricas y experimentales básicas detrás del control cuántico de sistemas elementales materiales y del campo electromagnético. Para celebrar el otorgamiento del Premio Nobel de Física 2012 a investigadores pioneros en esta área, se describirá parte del trabajo de sus receptores, los profesores S. Haroche y D. J. Wineland. Esperamos que estas notas siembren el interés entre sus lectores sobre la riqueza del mundo cuántico y la enorme oportunidad de estudiarlo y de aprovecharlo que ha sido generada por los avances experimentales recientes.

2. El modelo de Jaynes-Cummings.

El modelo de Jaynes-Cummings [1] establece un esquema para la descripción de dos sistemas cuánticos elementales interactuantes de los cuales se ha identificado un conjunto mínimo de variables de interés. Este sistema involucra un ente con sólo dos estados como opción razonable y otro sistema elemental cuya única variable de interés es su energía que, además, solo puede tomar valores que son múltiplos semienteros y positivos de la cantidad que denotaremos por $\hbar\omega_c$ con $\hbar = 1,0545717310^{-34}$ m²kg/s la constante de Planck.

En la práctica este sistema puede ser realizado en laboratorio de forma aproximada en al menos dos esquemas de gran interés. En ambos, el primer ente de interés es un átomo neutro o un átomo cargado positivamente que se prepara en un estado interno con todos los números cuánticos internos plenamente especificados y que interactua con radiación electromagnética con frecuencia y polarización controladas a tal grado que solamente transiciones atómicas entre el estado interno de preparación y otro estado plenamente determinado son altamente probables. En estas circunstancias, se dice que se cuenta con un átomo de dos niveles. El campo electromágnetico puede ser considerado como el otro sistema cuántico; suele exigirse que este tenga condiciones iniciales dadas, como por ejemplo la garantía de estar en el estado de vacío (ausencia de fotones) del modo de interés en la región del espacio donde se encuentra el átomo. Posteriormente la interacción átomo -luz modificará este estado del campo electromagnético. A estos experimentos se les conoce como de electrodinámica cuántica en cavidades [3, 4, 5, 6]. El segundo esquema corresponde a que la luz se encuentre en un estado en que su descripción cuántica no sea necesaria. Esto ocurre por ejemplo, cuando la luz es emitida por un láser. En tales circunstancias el sistema cuya única variable de interés es la energía puede realizarse en términos de el estado cuántico de movimiento del propio átomo si este es confinado por una trampa armónica. En este esquema el átomo requiere primeramente ser enfriado al grado que el centro de masa pueda ser plenamente congelado, es decir llevado al estado de vacío vibracional. Se buscará además traducir a la interacción átomo-luz en una interacción efectiva del estado interno del átomo con su estado de movimiento [7]. Ambos esquemas se describen en mayor detalle más adelante.

Denotemos por

 $|e\rangle$ (Estado excitado) y $|g\rangle$ (Estado base)

a los estados internos del átomo que tienen energías $\hbar\omega_A/2$ y $-\hbar\omega_A/2$,asociadas con un Hamiltoniano H_A . Concentremonos en un solo modo del campo electromagnético,

$$\vec{E}(\vec{r}) = i \sqrt{\frac{\hbar \omega_c}{2\epsilon_0 \tau}} \left(a \ e^{i \vec{k}_c \cdot \vec{r}} \ \hat{\epsilon} \ - \ a^{\dagger} \ e^{-i \vec{k}_c \cdot \vec{r}} \ \hat{\epsilon}^* \right)$$

con una frecuencia cuasi resonante con la frecuencia de la transición atómica,

 $\omega_A \cong \omega_c$,

A éste modo le asociamos el hamiltoniano que nos da la energía en términos del número de fotones en dicho modo,

$$H_C = \hbar\omega_c \left(a^{\dagger}a + \frac{1}{2}\right).$$

La interacción átomo-campo es de tipo dipolar,

$$H_{int} = -\vec{d} \cdot \vec{E}(\vec{r}_{cm}) \qquad \mathbf{y} \qquad \vec{d} = q\vec{R} ,$$

donde \vec{r}_{cm} es la posición de centro de masa del átomo y \vec{R} es el operador de posición del electrón que efectuará la transición relativo al centro de masa del átomo. Entonces el hamiltoniano del sistema átomo+campo es

$$H = H_A + H_C + H_{int}$$

En términos de los operadores de transición atómica

$$\sigma_+ \equiv |e\rangle\langle g|$$
 y $\sigma_- \equiv |g\rangle\langle e|$,

y el operador de inversión atómica

$$\sigma_3 = |e\rangle \langle e| - |g\rangle \langle g| ,$$

tenemos que

$$H_A = \frac{\hbar\omega_A}{2}\sigma_3 , \qquad (1)$$

y la interacción dipolar se escribe en la forma

$$H_{int} = \hbar g(\vec{r}_{cm}) \,\sigma_{+} \,a + \hbar g_{1}(\vec{r}_{cm}) \,\sigma_{-} \,a + \hbar g(\vec{r}_{cm})^{*} \,\sigma_{-} \,a^{\dagger} + \hbar g_{1}(\vec{r}_{cm})^{*} \,\sigma_{+} \,a^{\dagger} ,$$

donde las frecuencias $~g(\vec{r}_{cm})~~{\rm y}~~g_1(\vec{r}_{cm})$ están definidas por

$$\begin{split} \hbar g(\vec{r}_{cm}) &\equiv -i \ g_0 \ e^{i \vec{k}_c \cdot r_{cm}} \ , & \hbar g_1(\vec{r}_{cm}) \ \equiv -i \ g_{10} \ e^{i \vec{k}_c \cdot r_{cm}} \ , \\ g_0 &\equiv \sqrt{\frac{\hbar \omega_c}{2\epsilon_0 \tau}} \ \langle e| \ \vec{d} \ |g\rangle \cdot \hat{\epsilon} \ , & g_{10} \ \equiv \sqrt{\frac{\hbar \omega_c}{2\epsilon_0 \tau}} \ \langle g| \ \vec{d} \ |e\rangle \cdot \hat{\epsilon} \ . \end{split}$$

La aproximación de onda rotante corresponde a despreciar en H_{int} los términos de alta frecuencia de oscilación que son aquellos proporcionales a $g_1(\bar{r}_{cm})$. Esta aproximación es válida cuando las escalas de tiempo de interés son mucho mayores que uno entre las frecuencias involucradas en el problema $(1/\omega_A \text{ y} 1/\omega_c)$. Se obtiene finalmente el Hamiltoniano de Jaynes-Cummings

$$H = \frac{\hbar\omega_A}{2}\sigma_3 + \hbar\omega_c \left(a^{\dagger}a + \frac{1}{2}\right) + \hbar g(\vec{r}_{cm}) \sigma_+ a + \hbar g(\vec{r}_{cm})^* \sigma_- a^{\dagger} .$$
(2)

Aquí g_0 es la constante que va a medir la intensidad del acoplamiento entre el átomo y el campo.

Los estados estacionarios de (2) se pueden escribir en términos de superposiciones de los producto tensoriales de $|e\rangle \ge |g\rangle$ con los estados de Fock:

$$\{ \ |e,n\rangle \ \equiv \ |e\rangle \otimes |n\rangle \ , \ |g,n\rangle \ \equiv \ |g\rangle \otimes |n\rangle \ : \ n=0,1,2,\dots \ \}$$

Los elementos de esta base son conocidos como estados desnudos. Resulta que para cada n = 0, 1, 2, ...,los estados

$$\{ |e,n\rangle, |g,n+1\rangle \}$$
, (3)

se transforman entre sí al aplicar H. Esto nos permite diagonalizar (2) en cada subespacio, obteniendo las energías propias

$$E_0 = -\frac{\hbar}{2}\Delta$$
 y $E_{\pm}(n) = \hbar\omega_c(n+1) \pm \frac{\hbar}{2}\Omega_n(\Delta)$ $(n = 0, 1, 2, ...)$,

donde $\Delta = \omega_A - \omega_c$ es el desentonamiento y

$$\Omega_n(\Delta) \equiv \sqrt{\Delta^2 + 4|g(\vec{r}_{cm})|^2(n+1)} ,$$

es la frecuencia de Rabi. Los vectores propios correspondientes son $|g,0\rangle$ y

$$|n,+\rangle = \cos\left(\frac{\theta_n}{2}\right)e^{-i\phi/2}|e,n\rangle + \sin\left(\frac{\theta_n}{2}\right)e^{i\phi/2}|g,n+1\rangle,$$

$$|n,-\rangle = -\operatorname{sen}\left(\frac{\theta_n}{2}\right)e^{-i\phi/2}|e,n\rangle + \cos\left(\frac{\theta_n}{2}\right)e^{i\phi/2}|g,n+1\rangle, \quad (4)$$

donde $\theta_n \in [0,\pi)$ y $\phi \in [0,2\pi)$ son los ángulos definidos por

$$\tan(\theta_n) = \frac{2|g(\vec{r}_{cm})|}{\Delta}\sqrt{n+1} \quad y \quad g(\vec{r}_{cm}) = |g(\vec{r}_{cm})| e^{-i\phi}$$

Estos vectores propios son conocidos como estados vestidos. Ahora es posible obtener la dinámica de un estado general mediante los estados propios. Consideramos como el estado inicial para el campo a una superposición de varios estados , $|\psi_{campo}(0)\rangle = \sum_n C_n |n\rangle$ y como estado inicial de átomo el estado excitado. Explícitamente el estado inicial del sistema átomo - campo es

$$|\psi_{tot}(0)\rangle = \sum_{n} C_n |n\rangle |e\rangle, \qquad (5)$$

Entonces el vector de estado para los tiempos t > 0 esta dado por

$$|\psi_{tot}(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi_{tot}(0)\rangle = \sum_{n} C_n [\cos(\frac{\alpha_n}{2})|n, +\rangle e^{-iE_+(n)t/\hbar} - \sin(\frac{\alpha_n}{2})|n, -\rangle e^{-iE_-(n)t/\hbar}].$$
(6)

Las oscilaciones de Rabi corresponden a la variación sinusoidal de las poblaciones entre los estados $|n, \pm\rangle$. Diferentes períodos ocurren para diferentes estados de número de fotones. La finitud del periodo de oscilación resulta del carácter discreto de los estados de población del campo electromagnético.

3. Electrodinámica Cuántica en Cavidades. Realización del Hamiltoniano de JC

La electrodinámica cuántica en cavidades (CQED) estudia la interación entre la materia y los campos electromagnéticos cuánticos en regiones delimitadas del espacio, partiendo desde una pequeña cantidad de fotones de una cierta frecuencia interactuando con algunos átomos, hasta la generalización de la interacción de campos clásicos con gases moleculares. En la actualidad, CQED se realiza experimentalmente a longitudes de onda asociadas a microondas o al visible. Aunque ambas comparten propiedades físicas generales, presentan diferentes características específicas [8].

En la región electromagnética de las microondas, átomos altamente excitados, llamados *átomos Rydberg* [12], interactúan con cavidades superconductoras que permiten modos de ondas milimétricas. La disipación en estos procesos es extremadamente baja. Mientras que en las cavidades ópticas, los estados de excitación atómica son más bajos. Los átomos interactúan con cavidades que tienen tamaños inferiores a milímetros y usualmente se encuentran a temperatura ambiente. Esta interacción es mucho más rápida y en general los efectos de disipación son importantes. Esto nos hace ver que átomos con transiciones con longitud de onda en el visible, pueden ser facilmente acoplados dentro o fuera de la cavidad.

La realización experimental de sistemas tipo Jaynes-Cummings en cavidades considera a un átomo con 2 niveles interactuando con un campo electromagnético cuántizado en una cavidad de calidad $Q = \omega_0 T_r$, donde T_r es el tiempo de relajación. Los átomos que generalmente se utilizan de manera experimental, son átomos alcalinos, pues estos están conformados por un carozo compacto, formado de capas electrónicas internas completas y un único electrón en una órbita poco ligada. Este electrón se excita a un estado de alto número cuántico n (típicamente ~ 50) y con un momento angular orbital $\ell = |m_{\ell}| = n - 1$. En estas circunstancias, la función de onda electrónica esta localizada en una región circular y por ello se les llama estados de Rydberg circulares. Estos estados generalmente poseen un elemento de matriz dipolar eléctrico muy alto en una transición entre estados vecinos, proporcional a n^2 , que corresponde a 1250 unidades atómicas para la transición 51-50. Su vida media es muy larga (~ 30 ms para n = 50). En términos clásicos, la aceleración del electrón es mínima, y por lo tanto las pérdidas por radiación son muy bajas. La transición entre los estados vecinos involucra longitudes de onda milimétricas (51.099 GHz para la transición entre n = 51 y 50). Su producción puede detectarse facilmente por ionización. Finalmente, la transición dipolar más probable permite modelar a este átomo como de dos niveles.

El modo de la cavidad y la frecuencia de transición del átomo no necesariamente están en resonancia, pero son suficientemente cercanos como para que el campo sea capaz de inducir una transición atómica, del estado $|g\rangle$ al estado $|e\rangle$, perdiendo un fotón en el proceso, el sistema resonante que se describe recibe el nombre de microwave amplification via z-motion-induced emission of radiation

(mazer).

En general las cavidades reales, constan de espejos que funcionan como resonadores y estan finamente pulidos con el objetivo de incrementar el valor de la calidad Q de la cavidad, por otra parte necesitan ser enfriadas a temperaturas de unas cuantas decimas de Kelvin para reducir la intervención de radiación térmica. Experimentalmente, las configuraciones más utilizadas son *Fabry-Perot* y de cavidad cilíndrica cerrada.

En el régimen de baja Q, los fotones emitidos por los átomos son rapidamente disipados de manera irreversible por las paredes de la cavidad. En 1946, Purcell predijo que las tasas de emisión atómicas se modificarían al modificar la geometría en la cual está contenido el átomo [13, 14]. Sistemas donde Q es baja se utilizan actualmente para estudiar las propiedades que presentan los átomos al modificar sus tasas de emisión en microcavidades de estado sólido. En el régimen de alta Q la interacción entre el átomo y la radiación se da de manera coherente y permite la observación de evolución reversible de la interacción átomo - campo.

El acoplamiento entre un átomo de Rydberg y el campo, funciona de tal manera que el sistema ideal de 2 niveles acoplado a un solo modo de radiación son una muy buena aproximación. Las cavidades milimétricas superconductoras con un alto Q interactuando con átomos de Rydberg circulares presentan condiciones adecuadas para estudiar la forma en que ocurre el acoplamiento entre materia y radiación. Los átomos de Rydberg pueden ser preparados eficientemente desde niveles de Rydberg con momento angular bajo, por medio de transiciones de multifotones de radiofrecuencia. Los niveles circulares pueden ser detectados eficientemente y selectivamente por campos de ionización.

El grupo del Prof. Haroche utiliza cavidades basadas en resonadores de Fabry-Perot fabricados con dos espejos semiesféricos colocados uno frente a otro separados por pocos cent'imetros. Este grupo es líder en la fabricación de estos dispositivos, ya que consiguen valores de Q, del órden de 10^{10} a 10^{12} [4]. Algo importante de remarcar es que en estos experimentos los modos del campo tienen tiempos de vida media más largos que los tiempos de interacción típicos. Las paredes de la cavidad son enfriadas hasta alcanzar una temperatura de aproximadamente medio grado Kelvin para eliminar los efectos térmicos sobre el sistema y para optimizar la reflectividad intrínseca de los espejos superconductores. El volúmen efectivo de la cavidad V es pequeño, de alrededor de $V = 0.7 cm^3$, el campo producido por un sólo fotón es $E_0 = \sqrt{\hbar \omega / 2\epsilon_0 V}$. Usualmente los átomos son de Rubidio o Cesio. Estos salen a través de un orificio provenientes de un horno y después de aplicar un conjunto de láseres que funcionan como selectores de velocidad en V, cada átomo de interés esta en un estado interno inicial. Esto, en general, signifíca excitar al átomo y llevarlo a la configuración electónica interna deseada, ya sea $|e\rangle$ o $|g\rangle$. Puede realizarse de manera simultánea controlando el corrimiento Doppler en las frecuencias de los láseres y solo ciertos átomos con ciertas velocidades serán excitados. Despúes del proceso anterior, el átomo entra en la cavidad y el tiempo de interacción es determinado por la velocidad de átomo. Los átomos con velocidad muy diferente nunca son excitados y cruzan la cavidad sin afectar el campo.

Ilustremos con un ejemplo conceptualmente muy importante, qué se puede hacer con el sistema que acabamos de describir. A partir de la hipótesis de Planck, la cuantización de la radiación electromagnética se reconoce como un hecho. Además de la ley de radiación de cuerpo negro, muchos fenómenos como el efecto Compton la emisión espontánea, y las correciones radiativas de QED, apuntan a la existencia de los cuantos de campo. Sin embargo, en muchos casos las pruebas de cuantificación de campo estan ligadas a la naturaleza discreta de la corriente de fotodetección, por lo que interpretaciones alternativas basadas en una descripción clásica del campo y un sistema material cuantizado pueden utilizarse. En los experimentos de CQED el caracter discreto predicho por la QED de la energía de la radiación almacenada en un modo de la cavidad, ha sido corroborado experimentalmente sin esta ambiguedad.

La realización experimental del Hamiltoniano de Jaynes-Cummings en un sistema de CQED[15] confirmó esa cuantización al observar directamente las oscilaciones de Rabi descritas en la sección anterior. Este experimento clave, a sido base de muchos otros que reiteran no solo las predicciones teóricas de la CQED sino permiten explorar la capacidad de control del estado cuántico átomo - campo.

4. Iones ultrafríos en trampas electromagéticas. Realización del Hamiltoniano de JC

4.1. Trampas de iones.

Para confinar a un ión se necesitan potenciales que lo atraigan en las tres direcciones x, y y z. Este tipo de potenciales no se puede lograr sólo con un potencial electrostático, debido al teorema de Earnshaw. Este teorema nos dice que en una situación electrostática, en una región del espacio libre de cargas no se puede tener un potencial atractivo en las tres direcciones. Lo anterior se sigue de la ecuación de Poisson,

$$\nabla^2 \Phi = 0.$$

Si se quiere un potencial tipo oscilador armónico en las tres direcciones, es decir, un potencial del tipo

$$\Phi = \alpha x^2 + \beta y^2 + \gamma z^2. \tag{7}$$

La ecuación de Poisson implica

$$\alpha + \beta + \gamma = 0,$$

por lo que se necesita que al menos una de las constantes del oscilador α , β o γ sea negativa, es decir, que el potencial sea repulsivo en alguna dirección. Por lo anterior para confinar a un ión se necesitan campos electrstáticos o magnetostáticos combinados, o bien, campos dependientes del tiempo.

Las trampas de Penning y de Paul, en su diseño original, usan el mismo conjunto básico de electrodos. Estos electrodos tienen la forma de equipotenciales correspondientes a un potencial cuadrupolar de la forma

$$\Phi(r,z) = -\frac{U_0}{R_0^2} (2z^2 - r^2) \tag{8}$$

donde $r^2=x^2+y^2$ y $R_0^2=r_0^2+2z_0^2$ es una constante geométrica que depende de la trampa.

4.1.1. Trampa de Penning.

Esta trampa se caracteriza porque el confinamiento de partículas cargadas, sean estas electrones o iones, se logra mediante un potencial electrostático cuadrupolar y un campo magnético uniforme. El movimiento de las partículas cargadas en la trampa puede descomponerse en tres partes: una oscilación axial de frecuencia $\omega_z = \sqrt{|qU_0|/mc^2}$, un movimiento circular rápido de ciclotrón con frecuencia $\omega_c = |qB_0|/mc$, y uno más lento que tiene un radio mayor que el anterior, y que se denomina de magnetrón. La combinación de estos dos últimos da como resultado un movimiento que al ser proyectado en el plano XY corresponde a epiciclos. El movimiento de magnetrón se puede entender en términos de un potencial efectivo que posee un máximo sobre un círculo. En la práctica, la estabilidad de este movimiento resulta de un manejo adecuado de la región del espacio donde el campo magnético es cuasi homógeneo y del control de los efectos del ambiente.

Las trampas de Penning an sido utilizadas para carcterizar las propiedades intrínsecas de part[']iculas elementales como el electrón y el positrón [9]. Ellas han sido clave para el almacenamiento de antiprotones que luego son utilizados para producir el antihidrógeno [10, 11].

4.1.2. Trampa de Paul.

Esta trampa utiliza un campo eleéctrico cuadrupolar dependiente del tiempo

$$\Phi = \frac{U + V\cos\omega t}{r_0^2 + 2z_0^2} (r^2 - 2z^2)$$

Las ecuaciones de movimiento clásicas correspondientes son

$$\ddot{r} + \frac{2q}{m(r_0^2 + 2z_0^2)} (U + V \cos \omega t)r = 0$$

$$\ddot{z} - \frac{4q}{m(r_0^2 + 2z_0^2)} (U + V \cos \omega t)z = 0$$
(9)

y tienen la forma de las ecuaciones de Mathieu. Las soluciones de estas ecuaciones son acotadas en el espacio solo para condiciones iniciales muy específicas y que dependen de la relación carga - masa de las partículas. Esto convierte a las trampas de Paul en excelentes dispositivos para medir esta propiedad. Las soluciones acotadas se pueden describir aproximadamente como el resultado de oscilaciones lentas, también denominada seculares, con frecuencias fundamentales $\omega_{r,z} = \beta_{r,z} \omega/2$, moduladas por oscilaciones de amplitud generalmente mucho más pequeña y frecuencia mucho más grande. A este último movimiento se le denomina micromovimiento.

En las realizaciones experimentales del modelo de Jaynes-Cummings utilizando trampas de Paul se utiliza un ión ultra frío, i.e., un ión que requiere de la mecánica cuántica para la descripción de su movimiento de centro de masa. El movimiento de este se aproxima por el asociado a un oscilador armónico. El estado interno del ión en cuestión se escoge de tal suerte que en las condiciones experimentales pueda conectarse preferente con otro estado específico utilzando luz láser. Esto define al sistema de dos niveles. La interacción efectiva se logra aplicando láseres que conectan estos estados de forma adecuada. Esto fue realizado por primera vez en 1996 por el grupo que encabeza el Prof. Wineland . En ese trabajo se reporta la generación de estados térmicos, de Fock, y comprimidos para un ión aislado de ⁹Be⁺ confinado en una trampa de Paul de radiofrecuencia. Se detecta el estado de movimiento del átomo mediante el estudio de la evolución de los estados internos, e. g., colapso y resurgimiento, bajo la inflencia de un Hamiltoniano de Jaynes-Cummings[16].

5. Información cuántica en el laboratorio.

Estas notas contienen una breve desripción de los elementos básicos que sustentaron la realización experimental del modelo minimalista de Jaynes-Cummings. Los alcances asociados a este hecho fueron identificados en la década de 1990 por una comunidad que había desarrollado lo que hoy se conoce como Información Cuántica. En la Conferencia Internacional de Física Atómica de 1994 celebrada en Boulder, Colorado, Artur Ekert presentó una charla delineando las ideas de la computación cuántica [17], un nuevo tema para la mayor parte de la audiencia. Esto inspiró a Ignacio Cirac y Peter Zoller, quienes asistieron a la conferencia y estaban familiarizados con las capacidades (y limitaciones) de los experimentos de iones atrapados, para proponer un diseño básico para un ordenador que utilizara cuantos de movimiento de iones atrapados. [18]. Los elementos básicos de esta y otras propuestas de Cirac y Zoller se llevan hacia adelante en las diferentes versiones que involucran a iones atrapados, cavidades CQED, átomos neutros en gases degenerados atómicos y otros muchos sistemas. La propuesta de Cirac y Zoller rejuveneció el área y hoy en día hay cientos de grupos teóricos y experimentales en el mundo que trabajan en diversos aspectos de procesamiento de información cuántica.

Referencias

[1] E.T. Jaynes and F. W. Cummings, "Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser", *Proc. IEEE* **51**, 89 (1963).

- [2] B. W. Shore and P. L. Knight, *Journal of Modern Optics*, 40, 1195 (1993).
- [3] S.Haroche, Çavity Quantum Electrodynamicsïn "Fundamental Systems in Quantum Optics" les Houches session LIII J. Dalibard, J.M. Raimond et J. Zinn Justin diteurs, Elsevier Science Publishers (1992).
- [4] S. Haroche, Nobel Lecture: Controlling photons in a box and exploring the quantum to classical boundary", *Rev. Mod. Phys.* 85, 1083 (2013).
- [5] M. Mcke, J. Bochmann, C. Hahn, A. Neuzner, C. Nölleke, A. Reiserer, G. Rempe, and S. Ritter, "Generation of single photons from an atom cavity system", *Phys. Rev.* A 87, 063805 (2013).
- [6] A. Reiserer, C. Nlleke, S. Ritter, and G. Rempe, "Ground-State Cooling of a Single Atom at the Center of an Optical Cavity", *Phys. Rev. Lett.* 110, 223003 (2013).
- [7] D. J. Wineland, "Nobel Lecture: Superposition, entanglement, and raising Schrdingers cat", *Rev. Mod. Phys.* 85, 1103 (2013).
- [8] H. Walther, B. T. H. Varcoe, B. G. Englert and T. Becker. Çavity quantum electrodynamics", *Rep. Prog. Phys.* 69, 1325 (2006).
- [9] R. K. Mittleman, I. I. Ioannou, H. G. Dehmelt, and Neil Russell, "Bound on CPT and Lorentz symmetry with a trapped Electron", *Phys. Rev. Lett.* 83, 2116 (1999).
- [10] L. S. Brown and G. Gabrielse" Geonium theory: Physics of a single electron or ion in a Penning trap", *Rev. of Mod. Phys.* 58, 233 (1986).
- [11] G. Gabrielse, R. Kalra, W. S. Kolthammer, R. McConnell, P. Richerme, D. Grzonka, W. Oelert, T. Sefzick, M. Zielinski, D. W. Fitzakerley, M. C. George, E. A. Hessels, C. H. Storry, M. Weel, A. Mllers, and J. Walz (ATRAP Collaboration), "Trapped antihydrogen in its ground State", *Phys. Rev. Lett.* 108, 113002 (2012).
- [12] T. F. Gallagher, Rydberg Atoms", Cambridge University Press (1994).
- [13] E. M. Purcell, "Spontaneous emission probabilities at radio frequencies" Phys. Rev. 69, 681 (1946).
- [14] D. Kleppner, Inhibited Spontaneous Emission", Phys. Rev. Lett. 47, 233 (1981).
- [15] M.Brune, F.Schmidt-Kaler, A.Maali, J.Dreyer, E.Hagley, J.M.Raimond and S.Haroche, "Quantum Rabi oscillation: A direct test of field quantization in a cavity", Phys. Rev. Lett. 76, 1800 (1996).

- [16] D. M. Meekhof, C. Monroe, B. E. King, W. M. Itano, and D. J. Wineland, "Generation of nonclassical motional states of a trapped atom", Phys. Rev. Lett. 76, 1796 (1996).
- [17] A. Ekert, Atomic Physics 14", edited by D. J. Wineland, C. E. Wieman, and S. J. Smith (American Institute of Physics, New York) pp. 450 (1995).
- [18] J. I. Cirac and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. 74, 4091 (1995).

Técnicas de detección de trazas moleculares para diagnóstico médico no invasivo.

Notas de la escuela de Verano, EVER2013

Dr. Antonio Marcelo Juárez Reyes Instituto de Ciencias Físicas UNAM

juarez@fis.unam.mx

CONTENIDO

1.- Motivación. La diabetes en México. Objetivos del proyecto de detección de trazas

2.- Definiciones y conceptos generales

3.- Técnicas de cavidades ópticas en el infrarrojo medio

4.- Técnicas de espectroscopia por transferencia de protones

5.- Técnicas de cromatografía de gases con análisis de masas e ionización

6.- Técnicas de detección por Fourier Transformed Infrared Spectroscopy y Laser Induced Fluorescence

7.- Estudio de trazas en México y su futuro **Referencias**

1.- Motivación: La diabetes en México

La diabetes mellitus tipo 2 (DMT2) ha crecido en rangos epidémicos en la última década. Se estima que alrededor de 346 millones de personas viven con diabetes en el mundo [Scully 2012]. La diabetes mellitus tipo 2 (DMT2) es la responsable de más del 90% de todos los casos de diabetes, y entre el 60 y 90% están relacionados con obesidad [Kahn 2006]. En México, la DMT2 tiene una prevalencia del 14.4%, esto significa que más de 16 millones de mexicanos están afectados por la enfermedad. A pesar de las mejorías en el tratamiento, esta enfermedad es la principal causa de ceguera, enfermedad renal terminal, neuropatías debilitantes, amputación de miembros, infarto del miocardio y embolias [Villalpando 2010 - ENSANUT 2012]. La DMT2 es una enfermedad clínica v genéticamente heterogénea resultado de la interacción entre factores genéticos y ambientales. Clínicamente la DMT2 se define como hiperglucemia en ayuno o postprandial. Por lo anterior resulta muy importante monitorear con precisión y frecuencia los niveles sanguíneos como parte central en cualquier tratamiento y seguimiento de la enfermedad. Sin embargo, generalizar la práctica del monitoreo adecuado de glucosa en la población ya diagnosticada con diabetes o con propensión a este mal, en sangre, ha demostrado ser una meta difícil de alcanzar. En México, de acuerdo a los resultados de la última encuesta de nutrición (Encuesta de salud del año 2012), menos de 1.6 millones de individuos de los 6.4 millones que se saben con la enfermedad, se encuentran con un control adecuado de los niveles de glucosa sanguínea. Parte de esta problemática se origina en el hecho de que el procedimiento preciso y confiable de monitoreo de glucosa en sangre requiere de punciones frecuentes, kits cuyo costo es elevado para personas de bajos recursos así como instrumental analítico que, o no existe, o es complicado de transportar a regiones geográficas remotas, en particular en el ámbito rural de México. Aunado a esto, las pruebas clínicas precisas, en sangre, requieren de personal calificado. Lo anterior se refleja en un costo que es inaccesible para los segmentos de bajos recursos del país y que son, incidentalmente, el segmento

más afectado por la diabetes tipo 2. En este contexto, el desarrollo de un método no invasivo, portátil, que requiera para su operación de un nivel básico de entrenamiento, y que tenga el nivel de confiabilidad y precisión comparable con métodos tradicionales resulta claramente ventajoso.

El análisis de metabolitos presentes en concentraciones típicamente ultra-diluídas en el aliento proporciona información muy valiosa sobre la bioquímica y metabolismo humanos. Esta técnica, que actualmente está emergiendo de manera dinámica gracias al desarrollo de instrumentación espectroscópica compacta, proporciona posibilidades muy grandes de diagnóstico no invasivo en diversos padecimientos. Debido al serio problema de la diabetes en México el grupo interdisciplinario que presenta este grupo ha decidido enfocar sus esfuerzos a este padecimiento que aqueja a un porcentaje muy importante del país, y al cual se dedican cuantiosos recursos del sector salud para atender dolencias generadas por la diabetes. El enfoque principal de desarrollar una herramienta intuitiva y portátil será de coadyuvar al diagnóstico en etapas iniciales del desarrollo de la diabetes, en vez de hacerlo en etapas en las que el avance de esta dolencia obligue a tomar acciones correctivas.

Los objetivos que se esperan alcanzar con el proyecto de trazas moleculares en el ICF-UNAM son:

- 1) Contar con instrumentos propios, desarrollados localmente, que permitan monitorear de manera no invasiva a pacientes diabéticos y medir sus tasas de metabolismo de glucosa de manera precisa.
- Contar con un estándar, adaptado a la cultura y genética mexicanas, de niveles de biomarcadores asociados al metabolismo de la glucosa. Los estándares que actualmente se están desarrollando están basados en estudios poblacionales europeos, principalmente.
- 3) Contar con un proceso de metrología estricta de los metabolitos a medir y de la correlación entre las medidas realizadas como parte de este proyecto y las mediciones fisiológicas estándar y tradicionales, con el fin de tener una base sólida para los diagnósticos futuros.
- 4) La posibilidad de desarrollar instrumentos con tecnología propia, portátiles y de uso intuitivo permite contemplar la posibilidad a futuro de socializar su uso en ambientes rurales o remotos, donde el acceso a análisis clínicos especializados sea difícil. Al final de este proyecto un resultado específico que se espera es contar con un prototipo miniaturizable y masificable, para su uso en programas extensivos del sector salud.
- 5) Coadyuvar, con la metodología propuesta en la detección temprana de la diabetes. Es bien sabido que esto permite extender la calidad y expectativa de vida de los pacientes diabéticos.

2.- Definiciones y conceptos generales

En este documento se presenta una visión general e introductoria del estudio de trazas moleculares, las técnicas que se emplean para detectarlas y las aplicaciones de esta área emergente de la física. Se incluyen algunas referencias útiles para que el estudiante interesado pueda, si así lo deseare, profundizar en el tema. Asimismo, este capítulo describe, de manera general, las técnicas más comunes y mejor establecidas en el el tema de detección de trazas moleculares, con el fin de enterar al alumno interesado en la existencia de estas técnicas Como documento introductorio y necesariamente general, no se presentan detalles específicos de estas técnicas, en aras de resaltar las aplicaciones de esta área de la física molecular. El alumno interesado en profundizar el tema puede consultar una revisión en resúmenes especializados [1]

Se definen las trazas moleculares en el presente trabajo como aquellas especies moleculares que se encuentran diluidas en fase gaseosa en nuestra atmósfera, en partes de 1 por mil millones volumétrica o menores. Estas moléculas ultra-diluídas puden tener su origen en distintas fuentes, por ejemplo, pueden corresponder a moléculas contaminantes en la atmósfera [2], a marcadores metabólicos generados en un proceso biológico o biomédico específico [3], a hormonas de comunicación entre plantas [4], entre otras posibilidades. A este nivel de dilución, las técnicas convencionales de espectroscopia de absorción, emisión o químicas no tienen la capacidad de cuantificar la presencia de un tipo particular de molécula diluida de manera precisa. Es justamente la cuantificación de las trazas moleculares, además de su identificación lo que hace tan relevante este campo [5].

Para ilustrar la utilidad de la técnica de detección de trazas moleculares mencionaré varios ejemplos a continuación de áreas o usos en los que la capacidad de detectar y cuantificar la presencia de moléculas en la atmósfera es relevante en casos prácticos.

a.- Control de tiempos de maduración de frutas (Post harvest control) Algunas plantas y frutos sincronizan sus procesos y se "comunican" por medio de la emisión de etileno[4]. Sin embargo, para poder estudiar (y eventualmente controlar) estos procesos de comunicación se debe ser capaz de detectar en la atmósfera niveles de etileno que lo califican como una traza molecular. La comunicación entre plantas en un invernadero puede alcanzar niveles de decenas de partes por mil millones (ppmm). El desarrollo de sensores de etileno a estos niveles y la implementación de sistemas de lazo cerrado para regular el nivel de etileno en bodegas o camiones de transporte de frutas es actualmente un reto tecnológico que se está implementando a nivel comercial en Europa, principalmente, donde el transporte de frutos y el correcto control de sus tiempos de maduración es fundamental [6].

b.- Detección temprana de fugas o acumulación de gases explosivos en minas. Cada año a nivel mundial mueren cientos de mineros por accidentes relacionados con la acumulación de gas grisú. Nuestro país no es ajeno a este tipo de eventos tan desafortunados. Un sistema de detección de gas grisú, dotado de la ingeniería necesaria para generar alertas y reportar de manera automatizada los niveles de gases explosivos en una mina es de indudable importancia y las técnicas de detección de trazas moleculares proporcionan una alternativa eficiente, económicamente viable y técnicamente asequible. c.- Detección de substancias ilícitas o explosivos [7]. Los sistemas de seguridad de los aeropuertos en nuestro país dependen totalmente, en la actualidad, de sistemas de detección de explosivos y substancias ilícitas basados en detectores de trazas moleculares, típicamente del tipo de tubo de deriva iónica.

d.- Método de diagnóstico médico por análisis no invasivo del aliento humano. Esta técnica, que tiene como principio cuantificar la presencia de marcadores de enfermedades (la acetona, por ejemplo, en rangos de 10 partes por millón en el aliento humano indica la presencia de diabetes *mellitus* del tipo 2) se encuentra actualmente en proceso de desarrollo en Europa y en Estados Unidos [8]. El potencial económico, social y humano que una técnica de diagnóstico de este tipo tiene sobre el bienestar de la población es muy grande. No hay técnica menos invasiva que la del análisis del aliento humano. La base de

esta técnica tan importante es, esencialmente, la detección de trazas moleculares en el aliento humano en partes por mil millones.

e.- Control de calidad de café. La industria del café, en términos económicos, es casi tan grande como la del petróleo. Nuestro país es un productor importante de este producto y los procesos de control de calidad, evaluación del tipo de café y la selección de este es un proceso con un valor comercial muy elevado. Una máquina o proceso capaz de informar a un cliente potencial de la calidad de un lote particular de café tiene un valor comercial muy grande. Las técnicas de detección de trazas moleculares, aunadas a métodos computacionales de análisis de componentes (tales como los algoritmos genéticos y el algoritmo PCA –principal component analysis-) permiten en la actualidad realizar estudios diferenciadores de la calidad y el tipo de un grano particular, a partir del análisis de las trazas moleculares generadas en el proceso de tostado [9].

f.- Prospección petrolera. A grandes rasgos, la prospección de una zona petrolera con potencial económico es un proyecto económicamente muy caro (cientos de millones de dólares) y complejo. Sin embargo, las zonas de riqueza petrolera potencial pueden detectarse de manera preliminar por un fenómeno conocido como "Microseepage anómalo" en términos sencillos, el filtrado de trazas moleculares (radón, butano y otros hidrocarburos ligeros) a través de los anticlinales que sellan a una reserva subterránea "marcan" la frontera en donde hay un pozo potencialmente útil de petróleo. Usando técnicas de detección de las trazas moleculares arriba mencionadas, se puede realizar una prospección preliminar relativamente barata y eficiente [10].

Por razones de espacio, y dado el carácter genera de este resumen se omite dar más detalles, pero para dar un panorama general, podemos mencionar otros ejemplos: el estudio de tasas metabólicas en el cuerpo humano o en animales usando medicamentos marcados isotópicamente y monitoreando la exhalación de CO2 marcado isotópicamente en el aliento [11]. Asimismo, estudios de el ciclo del carbono estudiando trazas moleculares en hielos polares, estudios de células senescentes al analizar los "vapores" exhalados por estas células en una caja Petri donde se les esté cultivando, así como mediciones de la emisión de vapores tóxicos en adhesivos usados en usos domésticos, con el fin de determinar que se encuentran en la norma mexicana y no será causa de enfermedades crónicas al largo plazo. Cabe mencionar que todos los ejemplos mencionados arriba son relevantes en la economía de nuestro país y el bienestar de sus ciudadanos que son, a final de cuentas, quienes pagan la cuenta de la investigación y desarrollo que se hace en nuestras universidades, y a quienes debemos nuestro quehacer como científicos o estudiantes. Para concluir esta sección, y en resumen, la detección de trazas moleculares en partes por mil millones o partes por millón es un tema relevante en varias áreas de la ciencia, tanto fundamental como aplicada.

¿cómo se implementa este tipo de técnicas?

Cada una de estas técnicas viene en varias presentaciones y modalidades. Una parte común que las une, es que estas técnicas requieren de la sinergia de la física molecular avanzada, con instrumentación en ingeniería de alto nivel Asimismo, todas estas técnicas comparten la necesidad de electrónica analógica y digital avanzadas, combinadas con técnicas de vacío, espectroscopia molecular avanzada, algoritmos de álgebra lineal y el conocimiento especializado que cada una de las ramas en donde tiene aplicación (Medicina, biología, defensa y seguridad nacional, agricultura protegida). En ese sentido, el área de detección de trazas moleculares es muy rica y necesariamente multidisciplinaria. A continuación presentaré, de maneara muy general, los principios de operación de cada una de estas técnicas. Estos instrumentos y técnicas se encuentran a disposición del grupo de Física Atómica, Molecular y Óptica del Instituto de Ciencias Físicas y su red de colaboradores. Los estudiantes interesados en aprender, trabajar o aplicar alguna o varias de estas técnicas puede visitarnos y formar parte del equio de desarrollo en alguno de los campos de aplicación y uso que hemos mencionado arriba. Para darle a los estudiantes una idea de las técnicas disponibles actualmente en México para este tipo de estudios, relacionados con la detección de trazas moleculares en fase gaseosa.

2 Técnicas de cavidades

La técnica de cavidades ópticas hace uso de resonadores ópticos (un par de espejos parabólicos, de alta reflectividad colocados frente a frente) para amplificar la absorción de la luz láser dentro de la cavidad (BBCEAS, broad band cavity enhanced absorption spectroscopy) o bien para medir el tiempo medio de vida de un fotón dentro de la cavidad (Cavity ring down spectroscopy [12]). El arreglo experimental típico de Cavity Ring Down consiste en un laser que se emplea para iluminar una cavidad óptica de alta "fineza", es decir, que está compuesta de espejos con una reflectividad muy cercana a 1 (en el caso de la cavidad del ICF la reflectividad de nuestros espejos es del 99.998%). Suponiendo que en la cavidad óptica no hay ninguna especie molecular presente, ocurre lo siguiente: Cuando la frecuencia del laser se encuentra en resonancia con uno de los modos de la cavidad, la luz se acumula dentro de la cavidad, aunque parte de esta escapa, debido a que la reflectividad de los espejos no es exactamente igual a 1. Si el laser es pulsado, la intensidad de salida obedece a una ley exponencial. La constante de decaimiento depende del valor de la reflectividad y se puede medir de manera sencilla con un osciloscopio. Durante este decaimiento, la luz va y viene de un espejo a otro muchas veces, de tal suerte que la trayectoria óptica de el rayo de luz es del orden de miles o decenas de miles de metros de longitud efectiva. Si uno coloca una muestra molecular dentro de la cavidad, tal que esta muestra tenga una transición resonante con la frecuencia del laser, esta especie absorberá la luz. En este caso, la constant original de decaimiento exponencial se modificará (existe manera de cuantificar cuanto) de tal manera que, midiendo la constant de decaimineto con la muestra molecular presente, y comparándola con aquella medida con la cavidad vacía, se puede cuantificar cuántas moléculas se encuentran presentes por unidad de volumen en la cavidad. El nivel de sensitividad de esta técnica alcanza valores de una parte por un millon de millones de moléculas, en una unidad de volume dada.. Hay otros sabores de estas técnias, tales como el "cavity leak out spectroscopy" y las técnicas de "multipass cells" que emplean espejos acromáticos para magnificar la trayectoria de un haz de luz dentro de una cavidad. Todas ellas se basan en el uso de fuentes de luz infraroja, espejos de alta reflectividad y tienen sensitividades muy elevadas. La figura 1 muestra, de manera esquemática, el arreglo experimental necesario para implementar la técnica de CRD. El equipo es relativamente sencillo y no excesivamente caro, salvo por la fuente de luz, por lo que puede implementarse de manera sencilla. En el Instituto de Ciencias Físcas de la UNAM contamos actualmente con un sistema de este tipo.



Figura 1. Arreglo experimental básico de Cavity Ring Down. Otras formas de medición con cavidades tienen arreglos semejantes, auque los principios de operación son diferentes.

3 Técnicas de espectroscopía por transferencia de protones

La espectroscopía por transferencia de protones (proton transfer spectroscopy) es una de las técnicas más poderosas y sensibles para detectar moléculas diluídas en la atmósfera[13]. El principio físico de este instrumento se basa en el proceso de transferencia de carga entre una molécula protonada de agua H_3O^+ y el compuesto a analizar, M

$${\rm H_3O^+ + M \longrightarrow MH^+ + H_2O}$$

Se puede probar que el número de procesos de transferencia de protones como función del tiempo [MH+]t es igual a

$$[MH^+]_t = [H_3O^+] k [M] t$$

Donde $[H_3O^+]$ = numero original de iones hidronio

 $[MH^+]_t$ = número de iones M creados por unidad de tiempo

k = Constante de reacción

[M] = densidad de la muestra

El esquema experimental con el que se logra esto se muestra en la figura 2



Figura 2. Esquema experimental de un espectrómetro por transferencia de protones. EN el ICF contamos con un tubo de deriva que puede emplearse para estos fines.

Esta técnica es muy poderosa y se usa actualmente en usos que van desde la física médica (análisis de aliento exhalado) a la cata de vinos y café de manera electrónica(referencia, nariz electrónica Austria).

4.- Técnicas de cromatografía de gases con análisis de masas e ionización

La cromatografía de gases basa su principio en la movilidad diferencial de moléculas al fluir a travez de un capilar. Las moléculas más pequeñas y menos polares se desplazan con mayor rapidez que las moléculas grandes y polares. A la salida del cromatógrafo se analiza el tiempo de salida de las especies, que está relacionado a la especie molecular específica. Una segunda etapa de ionización, que puede ser una trampa de i9ones, o bien un tubo de tiempo de vuelo, y análisis de masas permite separar con mayor sensitividad a las moléculas [14].

Existen varios tipos de cromatografía de gases (GC): la cromatografía gas-sólido (GSC), en fase líquida (HPLC) y la cromatografía gas-líquido (GLC), siendo esta última la que se utiliza más ampliamente, y que se puede llamar simplemente cromatografía de gases (GC). En la GSC la fase estacionaria es sólida y la retención de los analitos en ella se produce mediante el proceso de <u>adsorción</u>. Precisamente este proceso de adsorción, que no es lineal, es el que ha provocado que este tipo de cromatografía tenga aplicación limitada, ya que la retención del analito sobre la superficie es semipermanente y se obtienen picos de elución con colas. Su única aplicación es la separación de especies gaseosas de bajo peso molecular. La GLC utiliza como fase estacionaria moléculas de líquido inmovilizadas sobre la superficie de un sólido. La figura 3 muestra, de manera esquemática, el arreglo experimental empleado en la implementación de la cromatrografía de gases,sea esta gaseosa, líquida o en fase gaseosa. inerte.



Figura 3. Arreglo experimental general emleado, en el caso de cromatografía en fase liquida, en un cromatrógrafo de gases. El término "cromatógrafo " proviene del hecho histórico de que este tipo de instrumentos, se empleaban para separar tintas de distointos colores.

5 Tecnicas de Laser Induced flourescence y FTIR

La técnica de fluorescencia inducida por laser se basa en la excitación de la muestra a analizar, seguida del estudio de la fluorescencia emitida. Esta fluorescencia se puede medir de manera muy sensible usando técnicas de conteo fotónico. La longitu de onda de excitación se elije de tal manera que la sección transversal de excitación sea la más grande posible. Las aplicaciones prácticas de esta técnica son muy diversas, aunque el costo de un instrumento de LIF es relativamente caro. La figura 4 muestra el esquema experimental necesario para esta técnica



Figura 4. Arreglo exérimental para llevar a cabo espectroscopía molecular por fluorescencia inducida por laser.

FTIR (Fourier transformed Infrared spectroscopy) es una técnica para obtener espectros de absorción de moléculas basada en el uso de la transformada inversa de fourier de un interferograma [15]. Un espectrómetro FTIR consta de una fuente infrarrona de ancho de banda grande, un interferómetro del tipo de Michelson y un espejo móvil (ver figura 5). Al mover el espejo se generan interferogramas que cambian con la posición de el brazo.Al aplicar la transformada inversa de Fourier a este interferograma se obtiene el espectro de absorción de las moléculas bajo estudio. La ventaja de FTIR es que permite realizar estudios de fases sólidas, gaseosas o líquidas.



Figura 5. Arreglo experimental típico de un espectrómetro FTIR. **6.- Estudio de trazas en México y su futuro.**

Dada la relevancia en tantas áreas de investigación, tanto fundamentales como aplicadas, los estudios basados en técnias de cavidades son muy útiles y poderosos. En este sentido, en el instituto de Ciencias Físicas de la UNAM estamos desarrollando actualmente un grupo especializado en el estudio de trazas moleculares y su aplicación en distintas áreas. Para este propósito, nuestro grupo está incorporando y desarrollando la infraestructura y las redes de colaboración necesarias para contar con un laboratorio avanzado de detección molecular. En este sentido, actualmente nuestra red cuenta, en un solo lugar, con la infraestructura necesaria para llevar a cabo estudios de Proton Transfer Spectroscopy, Cavity Ring Down y otras variantes. Sumando a esto la colaboración con la facultad de Ciencias de la UNAM y el departamento de química de la Universidad Autónoma de

Morelos, así como el grupo de óptica y Física molecular aplicada de la Universidad de Delft, en conjunto, nuestro grupo cubre todas las áreas necesarias, en cuanto a infraestructura y capacidad técnica, mencionadas arriba. La segunda etapa de este interesante y ambicioso proyecto, consiste en usar esta infraestructura para atender áreas de la biología, la medicina y el medio ambiente, relevantes para nuestro país. La figura 6 muestra, esquemáticamente, el arreglo final de detección de trazas que se empleará para realizar estudios no invasivos de pacientes diabéticos, en particular para determinar biomarcadores que indiquen estadios tempranos de esta enfermedad.



Figura 6.- Esquema de la toma de muestras de aliento y su subsecuente estudio por absorción estimulada en cavidades.

Mientras escribo estas notas, nuestro grupo se encuentra en una etapa muy interesante de desarrollo y, hasta donde alcanza nuestro mejor conocimiento, no existe en México ni en Latinoamérica un esfuerzo semejante. Laboratorios de este tipo, al nivel de infraestructura con el que contamos en la UNAM sólo se puede encontrar actualmente en Delft, Holanda y Duserdolf en Alemania, grupos con los que nuestro laboratorio tiene ligas actualmente. Este momento es muy interesante en nuestro laboratorio, y cierro este documento invitando a los estudiantes interesados en realizar estudios avanzados de física molecular de alto nivel, e interesados en que estos estudios repercutan en la solución de problemas reales y relevantes del país, a contactarnos y ser parte de nuestro equipo de trabajo. **Cuernavaca Morelos, 27 de noviembre 2013.**

Referencias

- [1] Review of Scientific Instruments, 75, 8, page 2499 (2004)
- [2] Atmospheric Environment Volume 34, Issues 12-14, 2000, Pages 2063-2101
- [3] IEEE Sensors Journal Vol. 10, NO. 1, 2010
- [4] Environ. Microbiol. November 2002 vol. 68 no. 11 5342-5350
- [**5**] Rev. Sci Instrum. 79, 123110 (2008)
- [6] Annals of applied biology, 1985
- [7] Rev. Sci. Instrum. 75, 2499 (2004)
- [8] Anal. Chem., 2010, 82 (9), pp 3581–3587

[9] Applied Spectroscopy, Vol. 49, Issue 5, pp. 580-585 (1995)

[10] Remote Sensing Reviews Volume 18, Issue 1, 2000

[11] Mini Reviews in Medicinal Chemistry, Volume 7, Number 2, February 2007, pp. 115-129(15)

[12] http://www.laserfocusworld.com/articles/print/volume-37/issue-

5/features/spectroscopy/cavity-ringdown-technique-measures-absorption.html

[13] J. Am. Chem. Soc., 1983, 105 (15), pp 5133–5134

[14] http://www.sigmaaldrich.com/etc/medialib/docs/Aldrich/Bulletin/1/the-basics-of-gc.Par.0001.File.tmp/the-basics-of-gc.pdf

[15] International Biodeterioration & Biodegradation Volume 41, Issue 1, 1998, Pages 1–11

Vórtices Estacionarios Armónicos

Eugenio Ley Koo Instituto de Física, UNAM

October 9, 2013

Abstract

El campo de velocidades de vórtices estacionarios es solenoidal, y su rotacional es igual a la vorticidad. En consecuencia, el campo de velocidad se puede escribir como el rotacional de un potencial vectorial de velocidad, el cuál satisface la ecuación de Poisson con la vorticidad como la fuente. En regiones donde no hay vorticidad la ecuación de Poisson se reduce a la ecuación de Laplace, lo cual permite construir vórtices armónicos en el interior y exterior de círculos o elipses en coordenadas circulares, elípticas y bipolares. El potencial es normal al plano de coordenadas y continuo en las fronteras respectivas; el campo de velocidad ocurre en el plano, con componentes normales continuas y componentes tangenciales discontinuas en dichas fronteras. La discontinuidad correspondiente mide la vorticidad normal al plano y distribuida armónicamente en el perímetro de la frontera

1 Introducción.

Ésta es la versión escrita de la conferencia con el mismo título impartida en la XXI Escuela de Verano en Física. En esta sección se proporciona una visión de conjunto del material cubierto, empezando con los campos físicos característicos de los vórtices estacionarios: Campos de velocidad $\vec{u} (\vec{r})$, vorticidad $\vec{\omega} (\vec{r})$, y potencial vectorial de velocidad $A(\vec{r})$, sus características y relaciones, descritos en la Sec. 2. La sección 3 está centrada en la construcción del operador de Laplace en coordenadas circulares, elípticas y bipolares, y en la solución de la ecuación de Laplace en el interior y exterior de círculos o elipses coordenados, según el caso; las funciones armónicas respectivas constituyen bases escalares completas para construir los campos vectoriales que describen a los vórtices. La sección 4 ilustra la construcción sistemática de los campos de potencial, velocidad y vorticidad como soluciones de las ecuaciones formuladas en la Sec. 2, incluyendo sus condiciones de frontera para las geometrías y armonicidades de la sección 3; se incluyen formas analíticas para las líneas de campo de velocidad dentro y fuera de las fronteras respectivas. La discusión en la sección 5, ilustra trabajos de investigación en proceso, y conexiones con las matemáticas de funciones analíticas de variable compleja.

2 Campo de Velocidad, Vorticidad y Potencial Vectorial de Velocidad y sus Relaciones.

Los objetos físicos de nuestro interés son vórtices estacionarios en fluidos incompresibles. Su campo de velocidad $\vec{u}(\vec{r})$, describe al vector de velocidad en cada punto del fluido descrito por su vector de posición \vec{r} . Por ser un campo vectorial, el campo de velocidad se puede caracterizar mediante sus integrales de flujo a través de una superficie cerrada S,

$$\oint_{S} \vec{u} \cdot d\vec{a} = 0 \tag{1}$$

la cual es nula, y de circulación alrededor de una curva cerrada C

$$\oint_C \vec{u} \cdot d\vec{\ell} = \Gamma \tag{2}$$

siendo Γ la circulación. Alternativamente, usando los teoremas de Gauss y de Stokes, respectivamente:

$$\oint_{S} \vec{V} \cdot d\vec{a} = \int_{V} \nabla \cdot \vec{V} d\tau \tag{3}$$

$$\oint_C \vec{V} \cdot d\vec{\ell} = \int_S \left(\nabla \times \vec{V} \right) \cdot d\vec{a},\tag{4}$$

se tiene la descripción en términos de las ecuaciones diferenciales:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \tag{5}$$

$$\nabla \times \vec{u} = \vec{\omega},\tag{6}$$

donde $\overrightarrow{\omega}$ es la vorticidad, cuya integral de área

$$\int_{S} \vec{\omega} \cdot d\vec{a} = \Gamma \tag{7}$$

da la circulación como sigue de las Ecs. (2), (4) y (6). Es decir, la vorticidad equivale a una densidad de circulación por unidad de área.

El carácter solenoidal del campo de velocidad está descrito por las ecuaciones (1) y (5), que establecen la nulidad del flujo y la divergencia. La última permite reconocer que el campo de velocidad se puede escribir como el rotacional de un potencial vectorial de velocidad $\overline{A}(\vec{r})$:

$$\vec{u} = \nabla \times \vec{A} \tag{8}$$

asegurando que se satisface la Ec. (5).

La ecuación de Euler (6), da la relación entre los campos de velocidad y vorticidad, en cada punto del fluido. La sustitución de la Ec. (8) en la Ec. (6), da a su vez la relación entre el potencial vectorial y la vorticidad:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{A}) = \vec{\omega}$$

= $\nabla (\nabla \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}.$ (9)

Esta ecuación se reduce a la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \dot{A} = -\vec{\omega} \tag{10}$$

para el potencial con la vorticidad como el término de fuente, si el potencial se escoge de manera que también sea solenoidal, es decir $\nabla \cdot \vec{A} = 0$. La ecuación (6) también asegura que la vorticidad es solenoidal.

En aquellas regiones donde la vorticidad es nula, la Ec. (10) se reduce a la ecuación de Laplace,

 $\nabla^2 A = 0$

cuyas soluciones son funciones armónicas.

Adicionalmente, es útil y conveniente formular y aplicar las formas de condiciones de frontera de las Ecs. (1) y (2). Efectivamente, la integral de flujo calculada sobre la superficie de una caja de píldoras de Gauss, con caras paralelas a la superficie de frontera de la misma magnitud Δa y vectores unitarios normales a la frontera y en sentidos opuestos, y altura que se anula toma la forma

$$\oint_{S} \vec{u} \cdot d\vec{a} = \left(\vec{u}_{2} - \vec{u}_{1}\right) \cdot \hat{n}\Delta a = 0, \tag{11}$$

lo que implica que las componentes normales a uno y otro lado de la frontera son iguales. Por otra parte, la integral de circulación alrededor de un circuito rectangular de Stokes, con componentes tangenciales a la superficie de frontera iguales a $\Delta \ell$ en sentidos opuestos y altura nula, se reduce a

$$\oint_C \vec{u} \cdot d\vec{\ell} = \left(\vec{u}_2 - \vec{u}_1\right) \times \hat{n}\Delta\ell = \Delta\Gamma$$

donde \hat{n} es el vector unitario normal al circuito. Esta relación implica que la discontinuidad en las componentes tangenciales del vector de velocidad a uno y otro lado de la frontera es una medida de la circulación por unidad de longitud, $\Delta\Gamma/\Delta\ell$.

3 Soluciones de la Ecuación de Laplace en Coordenadas Circulares, Elípticas y Bipolares.

Las coordenadas circulares $(0 \le R < \infty, 0 \le \varphi \le 2\pi)$ elípticas $(0 \le u < \infty, 0 \le v \le 2\pi)$, y bipolares $(-\infty < \tau < \infty, 0 \le \sigma \le 2\pi)$ están definidas por medio de sus ecuaciones de transformación a coordenadas cartesianas

$$x = R\cos\varphi = f\cosh u\cos v = \frac{a\,\operatorname{senh}\tau}{\cosh\tau - \cos\sigma}$$
$$y = R\,\operatorname{sen}\varphi = f\,\operatorname{senh}\, u\,\operatorname{sen}\, v = \frac{a\,\operatorname{sen}\,\sigma}{\cosh\tau - \cos\sigma}.$$
(12)

Las transformaciones inversas, eliminando una u otra de cada par de coordendas, son respectivamente:

$$R^2 = x^2 + y^2 \tag{13}$$

que son círculos con centro en el origen y radio R;

$$\varphi = \tan^{-1}\left(y/x\right) \tag{14}$$

rectas radiales a partir del origen con inclinación φ ;

$$\frac{x^2}{f^2 \cosh^2 u} + \frac{y^2}{f^2 \sinh^2 u} = 1$$
(15)

elipses con centro en el origen, focos en $(x = \pm f, y = 0)$ eje mayor $2f \cosh u$, eje menor $2f \sinh u$, y excentricidad $1/\cosh u$;

$$\frac{x^2}{f^2 \cos^2 v} - \frac{y^2}{f^2 \sin^2 v} = 1 \tag{16}$$

hipérbolas que comparten los focos de las elipses, con semieje real $f \cos v$, semieje imaginario $f \sin v$, y excentricidad $1/\cos v$;

$$(x - a \coth \tau)^2 + y^2 = a^2 \operatorname{csch}^2 \tau \tag{17}$$

circulos anidados con centros en $(x = a \coth \tau, y = 0)$ y radios $a \operatorname{csch} \tau$, que para cada valor absoluto de τ aparecen situados simétricamente a uno y otro lado del eje y según el signo de τ ; y

$$x^{2} + (y - a\cot\sigma)^{2} = a^{2}\csc^{2}\sigma$$
(18)

círculos con centros en $(x = 0, y = a \cot \sigma)$ y radios $a \csc \sigma$, simétricamente situados arriba y abajo del eje x, y con intersecciones comunes en los puntos $(x = \pm a, y = 0)$. Se invita al lector a graficar algunas de estas curvas coordenadas para familiarizarse con sus geometrías, especialmente las bipolares.





Figura 1. Coordenadas circulares: círculos concéntricos con radios $\rho = 2, 4, 5, 7.5, 10$ y rectas radiales con inclinaciones $\varphi = 0, \pi/6, \dots, 11\pi/6, 2\pi$. Eje $x: 0 < \rho < \infty, \varphi = 0, \pi$. Eje $y: 0 < \rho < \infty, \varphi = \pi/2, 3\pi/2$.

Figura 2. Coordendas elípticas: elipses e hipérbolas confocales con semidistancia focal f = 4, y excentricidades respectivas de $1/\cosh u$ y $1/\cos v$ ($0 < u < \infty, 0 < v < 2\pi$). Eje x: $u_0 = 0, 0 < v < 2\pi$ en el segmento focal, y $0 < u < \infty, v = 0, \pi$ en la extensión del eje focal. Eje y: $0 < u < \infty, v = \pi/2, 3\pi/2$. Asíntotas de hipérbolas: $\varphi = v$.

Figura 3. Coordenadas bipolares: polos en $x = \pm a, y = 0$, círculos anidados alreddor de los polos y círculos que se interseccionan en los polos. Eje x: $-\infty < \tau < \infty, \sigma = 0$ en el segmento polar, y $-\infty < \tau < \infty, \sigma = \pi$ en la extensión del eje polar. Eje y: $\tau = 0, 0 < \sigma < 2\pi$. Círculos anidados tienden a los polos en el límite asintótico $\tau \to \pm \infty, 0 < \sigma < 2\pi$. Para construir el operador Laplaciano, empezamos con el cálculo de los desplazamientos en el plano en las coordenadas sucesivas:

$$d\vec{R} = \hat{\imath}dx + \hat{\jmath}dy = (\hat{\imath}\cos\varphi + \hat{\jmath}\,\mathrm{sen}\,\varphi)\,dR + R\,(-\hat{\imath}\,\mathrm{sen}\,\varphi + \hat{\jmath}\cos\varphi)\,d\varphi$$

$$= f\,(\hat{\imath}\,\mathrm{senh}\,u\cos v + \hat{\jmath}\cosh u\,\mathrm{sen}\,v)\,du + f\,(-\hat{\imath}\cosh u\,\mathrm{sen}\,v + \hat{\jmath}\,\mathrm{senh}\,u\cos v)\,dv$$

$$= \frac{a}{[\cosh\tau - \cos\sigma]^2} \left[\begin{array}{c} [\hat{\imath}\,(-\cosh\tau\cos\sigma + 1) - \hat{\jmath}\,\mathrm{senh}\,\tau\,\mathrm{sen}\,\sigma]\,d\tau \\ + [-\hat{\imath}\,\mathrm{senh}\,\tau\,\mathrm{sen}\,\sigma + \hat{\jmath}\,(\cosh\tau\cos\sigma - 1)]\,d\sigma \end{array} \right].$$
(19)

La forma general de este vector de desplazamiento

$$d\vec{R} = \hat{e}_1 h_1 dq_1 + \hat{e}_2 h_2 dq_2 \tag{20}$$

en términos de vectores unitarios y factores de escala, permite las identificaciones de los mismos en los respectivos sistemas de coordenadas:

$$\begin{aligned}
\hat{R} &= \hat{\imath}\cos\varphi + \hat{\jmath}\sin\varphi, \quad \hat{\varphi} = -\hat{\imath}\sin\varphi + \hat{\jmath}\cos\varphi \\
\hat{u} &= \frac{\hat{\imath}\sinh u\cos v + \hat{\jmath}\cosh u \sin v}{\sqrt{\cosh^2 u - \cos^2 v}}, \\
\hat{v} &= \frac{-\hat{\imath}\cosh u \sin v + \hat{\jmath}\sinh u\cos\sigma}{\sqrt{\cosh^2 u - \cos^2 v}}, \\
\hat{\tau} &= \frac{\hat{\imath}(-\cosh\tau\cos\sigma+1) - \hat{\jmath}\sinh\tau\,\sin\sigma}{\cosh\tau - \cos\sigma}, \\
\hat{\sigma} &= \frac{-\hat{\imath}\sinh\tau\,\sin\sigma + \hat{\jmath}(\cosh\tau\cos\sigma-1)}{\cosh\tau - \cos\sigma}
\end{aligned}$$
(21)

$$h_R = 1, h_{\varphi} = R; \ h_u = h_v = f \sqrt{\cosh^2 u - \cos v^2};$$

$$h_{\tau} = h_{\sigma} = a / \left(\cosh \tau - \cos \sigma\right).$$
(22)

Nótese la ortogonalidad de cada par de vectores unitarios, asociados a las coordenadas sucesivas.

El operador de Laplace en coordenadas curvilíneas ortogonales tiene la forma general:

$$\nabla^2 = \frac{1}{h_1 h_2} \left[\frac{\partial}{\partial q_1} \frac{h_2}{h_1} \frac{\partial}{\partial q_1} + \frac{\partial}{\partial q_2} \frac{h_1}{h_2} \frac{\partial}{\partial q_2} \right].$$
(23)

Correspondientemente, la ecuación de Laplace en las coordenadas sucesivas toma las formas:

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} R \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \end{bmatrix} \Phi(R,\varphi) = 0$$

$$\frac{1}{f^2 \left(\cosh^2 u - \cos^2 v\right)} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \end{bmatrix} \Phi(u,v) = 0$$

$$\frac{\left(\cosh \tau - \cos \sigma\right)^2}{a^2} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2}{\partial \sigma^2} \end{bmatrix} \Phi(\tau,\sigma) = 0.$$
(24)

La separabilidad e integrabilidad de la ecuación de Laplace para las soluciones factorizables

$$\Phi(R,\varphi) = R(R)\Phi(\varphi)$$

$$\Phi(u,v) = U(u)V(v)$$

$$\Phi(\tau,\sigma) = T(\tau)\Sigma(\sigma)$$
(25)

se puede implementar directamente. Aquí nos limitamos a dar las expresiones para los armónicos circulares, elípticos y bipolares:

$$\Phi_{m}(R,\varphi) = \left(A_{m}R^{m} + B_{m}R^{-m}\right) \left(\begin{array}{c} \operatorname{sen} m\varphi\\ \cos m\varphi\end{array}\right) \\
\Phi_{m}(u,v) = \left(A_{m}e^{mu} + B_{m}e^{-mu}\right) \left(\begin{array}{c} \operatorname{sen} mv\\ \cos mv\end{array}\right) \\
\Phi_{m}(\tau,\sigma) = \left(A_{m}e^{m\tau} + B_{m}e^{-m\tau}\right) \left(\begin{array}{c} \operatorname{sen} m\sigma\\ \cos m\sigma\end{array}\right)$$
(26)

para m = 1, 2, 3, ... determinado por la condición de periodicidad de las funciones angulares respectivas. Las soluciones isotrópicas, para m = 0, corresponden a seleccionar la función angular coseno, que se convierte en uno y las funciones radiales

$$\Phi_{0}(R) = A_{0} + B_{0} \ln R
\Phi_{0}(u) = (A_{0} + B_{0}u)
\Phi_{0}(\tau) = (A_{0} + B_{0}\tau)$$
(27)

logarítmica en el caso circular y lineales en los casos elíptico y bipolar. En vez de las funciones exponenciales en u y τ se pueden escoger sus combinaciones en términos de cosenos o senos hiperbólicos.

4 Vórtices Armónicos Dentro y Fuera de Círculos o Elipses Coordenados.

En esta sección se ilustra la construcción sistemática de los campos de potencial vectorial de velocidad, de velocidad y de distribución de vorticidad para vórtices armónicos en el interior y exterior de círculos y elipses asociados a coordenadas circulares y bipolares, y elípticas, respectivamente. Las bases para esta construcción son las relaciones entre los campos descritos en la Sección 2, y las funciones armónicas con las geometrías de la Sección 3.

Para vórtices en un plano, el potencial vectorial de velocidad se puede escoger perpendicular al plano x - y, que identificamos como \hat{k} . También debe ser una función armónica y finita tanto en el interior como en el exterior del círculo o elipse frontera que se escoja: $R = R_0$, $u = u_0$, $\tau = \tau_0$ en las coordenadas respectivas. En la notación de la Sec. 2,empezamos con coordenadas circulares:

$$\vec{A}_0^i = \hat{k} A_0^i, \quad \vec{A}_0^e = \hat{k} A_0^e \ln R$$
 (28)

$$\vec{A}_{m}^{i} = \hat{k}A_{m}^{i}R^{m} \begin{pmatrix} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{pmatrix}, \quad \vec{A}_{m}^{e} = \hat{k}A_{m}^{e}R^{-m} \begin{pmatrix} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{pmatrix}$$
(29)

La condición de continuidad del potencial en la frontera $R = R_0$ se traduce en que

$$A_0^i = A_0^e \ln R_0 = A_0 \ln R_0 \tag{30}$$

$$A_m^i R_0^m = A_m^e R_0^{-m} = A_0. ag{31}$$

Entonces, las partes radiales toman las formas comunes

$$A_0 \ln R_> \tag{32}$$

$$A_0 R_{<}^m R_{>}^{-m} \tag{33}$$

siendo $R_{<}$ y $R_{>}$ el menor y el mayor de R y R_{0} . En las coordenadas elípticas, las mismas ideas son válidas y los resultados toman las forma

$$\vec{A}_0(u,v) = \hat{k}A_0u_> \tag{34}$$

$$\vec{A}_m(u,v) = \hat{k}A_0 \cosh m u_{\leq} e^{-m u_{\geq}} \cos m v \tag{35}$$

$$\dot{A}_m(u,v) = \hat{k}A_0 \operatorname{senh} \mu_{\leq} e^{-mu_{\geq}} \operatorname{sen} mv$$
(36)

En coordenadas bipolares, se reconoce que los círculos con $\tau = \pm \tau_0$, simétricamente localizados con respecto al eje y ($\tau = 0$) tienen sus interiores en $-\infty < \tau < -\tau_0$ y $\tau_0 < \tau < \infty$, respectivamente, mientras que sus exteriores corresponden a $-\tau_0 < \tau < \tau_0$.

Los potenciales respectivos son entonces

$$\vec{A}_0\left(\left|\tau\right|,\sigma\right) = \hat{k}A_0\tau_{<} \tag{37}$$

$$\vec{A}_{m}(|\tau| \leq |\tau_{0}|, \sigma) = \hat{k}A_{0} \begin{pmatrix} \operatorname{senh} m\tau e^{\mp m\tau_{0}} \\ \operatorname{senh} m\tau_{0}e^{\mp m\tau} \end{pmatrix} \operatorname{sen} m\sigma$$
(38)

donde $\tau_{<}$ es el menor de τ y τ_{0} ; y los signos en las funciones exponenciales corresponde a valores de sus variables independientes, τ_{0} y τ , positivas y negativas, respectivamente.

Una vez que se conoce el potencial, su rotacional conduce al campo de velocidad, Ec. (8).

$$\vec{u}(q_1, q_2) = \nabla \times \vec{A} = \frac{1}{h_1 h_2} \begin{vmatrix} h_1 \hat{e}_1 & h_2 \hat{e}_2 & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial q_1} & \frac{\partial}{\partial q_2} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & A_z \end{vmatrix}$$
(39)

en los respectivos sistemas de coordenadas.

Los campos de velocidad con m = 0 toman las formas

$$\vec{u}_0 \left(R < R_0, \varphi \right) = 0, \quad \vec{u} \left(R \ge R_0, \varphi \right) = -\frac{\hat{\varphi} A_0}{R} \tag{40}$$

$$\vec{u}_0 \left(u < u_0, v \right) = 0, \quad \vec{u}_0 \left(u > u_0, \varphi \right) = -\frac{\hat{v} A_0}{f \sqrt{\cosh^2 u - \cos^2 v}} \tag{41}$$

$$\vec{u}_0\left(\tau_0 < \tau < \infty, \sigma\right) = 0, \quad \vec{u}_0\left(0 < \tau < \tau_0, \varphi\right) = -\frac{\hat{\sigma}A_0\left(\cosh\tau - \cos\sigma\right)}{a} \tag{42}$$

Los campos en el interior de cada círculo o elipse son nulos. Las líneas de campo en el exterior de: el círculo de radio R_0 son circunferencias de radio A_0/R en la dirección tangencial $\hat{\varphi}$; la elipse $u = u_0$ son elipses en la dirección tangencial \hat{v} , con magnitudes de la velocidad que dependen de la posición hiperbólica v; el círculo $\tau = \tau_0$ son circunferencias en la dirección tangencial $\hat{\sigma}$, con magnitudes de la velocidad que dependen de la velocidad que dependen de la posición angular σ .

En general, las líneas de campo de velocidad tiene elementos diferenciales

$$\vec{d\ell} = \hat{e}_1 h_1 dq_1 + \hat{e}_2 h_2 dq_2 \tag{43}$$

cuyas componentes son proporcionales a las respectivas componentes de la velocidad en cada punto

$$\vec{u} = \hat{e}_1 u_1 + \hat{e}_2 u_2; \tag{44}$$

es decir

$$\frac{h_1 dq_1}{u_1} = \frac{h_2 dq_2}{u_2}.$$
(45)

En los casos arriba mencionados la ausencia de la componente radial respectiva dR = 0, du = 0 y $d\tau = 0$ determina las líneas de campo sucesivas.

Para los vórtices con m = 1, 2, 3, ... los campos de velocidad asociados a los potenciales de las Ecs. (33-38), y sus líneas de campo asociadas en las sucesivas coordenadas tienen las siguientes formas.

1) Coordenadas Circulares:

$$\vec{u}_m \left(R < R_0, \varphi \right) = A_0 \frac{R^{m-1}}{R_0^m} m \left[-\hat{R} \operatorname{sen} m\varphi - \hat{\varphi} \cos m\varphi \right],$$
(46)

$$R^m \cos m\varphi = R_0^m \cos m\varphi_0; \tag{47}$$

$$\vec{u}_m \left(R > R_0, \varphi\right) = A_0 \frac{R_0^m}{R^{m+1}} m \left[-\hat{R} \operatorname{sen} m\varphi + \hat{\varphi} \cos m\varphi\right], \qquad (48)$$
$$R^m / \cos m\varphi = R_0^m / \cos m\varphi_0. \qquad (49)$$

$$^{n}/\cos m\varphi = R_{0}^{m}/\cos m\varphi_{0}. \tag{49}$$

$$\vec{u}_m \left(R < R_0, \varphi \right) = A_0 \frac{R^{m-1}}{R_0^m} m \left[\hat{R} \cos m\varphi - \hat{\varphi} \, \operatorname{sen} \, m\varphi \right], \tag{50}$$

$$R^m \operatorname{sen} m\varphi = R_0^m \operatorname{sen} m\varphi_0; (51)$$

$$\vec{u}_m \left(R > R_0, \varphi \right) = A_0 \frac{R_0^m}{R^{m+1}} m \left[\hat{R} \cos m\varphi + \hat{\varphi} \sin m\varphi \right]$$
(52)

$$R^m / \operatorname{sen} m\varphi = R_0^m / \operatorname{sen} m\varphi_0.$$
(53)

Nótese la igualdad de las componentes radiales en los campos de velocidad en la frontera circular $R = R_0$, en contraste con las discontinuidades de las componentes tangenciales.

2) Coordenadas elípticas:

 \vec{u}

$$(u < u_0, v) = \frac{A_0 e^{-mu_0}}{h} m \left[-\hat{u} \cosh mu \, \operatorname{sen} \, mv - \hat{v} \, \operatorname{senh} \, mu \cos mv \right]$$
(54)

$$\cosh mu \cos mv = \cosh mu_0 \cos mv_0; \tag{55}$$

$$\vec{u}(u > u_0, v) = \frac{A_0 \cosh m u_0 e^{-mu}}{h} m \left[-\hat{u} \operatorname{sen} mv + \hat{v} \cos mv\right]$$
(56)

$$e^{-mu}\cos mv = e^{-mu_0}\cos mv_0.$$
 (57)

$$\vec{u} \left(u < u_0, v \right) = \frac{A_0 e^{-mu_0}}{h} m \left[\hat{u} \operatorname{senh} mu \cos mv - \hat{v} \cosh mu \operatorname{sen} mv \right]$$
(58)

$$\operatorname{enh} mu \operatorname{sen} mv = \operatorname{senh} mu_0 \operatorname{sen} mv_0; \tag{59}$$

$$\vec{u}(u > u_0, v) = \frac{A_0 \operatorname{senh} m u_0 e^{-mu}}{h} m \left[\hat{u} \cos mv + \hat{v} \operatorname{sen} mv\right]$$
(60)

$$e^{-mu} \operatorname{sen} mv = e^{-mu_0} \operatorname{sen} mv_0.$$
(61)

Nótese también la igualdad de las componentes normales a la elipse de frontera $u = u_0$ en la dirección de \hat{u} , y la discontinuidad en las componentes tangenciales en la dirección de \hat{v} .

mai

3) En coordenadas bipolares:

S

$$\vec{u}_m(|\tau| < |\tau_0|, \sigma) = \frac{A_0 e^{\mp m\tau_0}}{h} m \left[\hat{\tau} \operatorname{senh} m\tau \cos m\sigma - \hat{\sigma} \cosh m\tau \operatorname{sen} m\sigma\right],$$
(62)

$$\operatorname{senh} m\tau \operatorname{sen} m\sigma = \operatorname{senh} m\tau_0 \operatorname{sen} m\sigma_0; \tag{63}$$

$$\vec{u}_m\left(|\tau_0| < |\tau|, \sigma\right) = \frac{A_0 \operatorname{senh} m\tau e^{+m\tau}}{h} m \left[\hat{\tau} \cos m\sigma \pm \hat{\sigma} \operatorname{sen} m\sigma\right], \tag{64}$$

$$e^{\mp m\tau} \operatorname{sen} m\sigma = e^{\mp m\tau_0} \operatorname{sen} m\sigma_0.$$
 (65)

Aquí también se nota la igualdad de las componentes normales de la velocidad en el círculo de frontera $\tau = \tau_0$, y la discontinuidad en las componentes tangenciales.

Las discontinuidades de las componentes tangenciales del campo de velocidad a uno y otro lado de la curva de frontera es una medida de la distribución de circulación en el perímetro de la misma como función de la posición angular:

$$\frac{\Delta\Gamma}{\Delta\ell} = -A_0/R_0, \quad -\frac{A_0}{f\sqrt{\cosh^2 u_0 - \cos^2 v}}, \quad -\frac{A_0\left(\cosh\tau_0 - \cos\sigma\right)}{a} \tag{66}$$

para los vórtices con m = 0, en las coordenadas sucesivas. Para las otras armonicidades y coordenadas:

$$\frac{A_0}{R_0} \begin{pmatrix} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{pmatrix}, \\
\frac{A_0}{f\sqrt{\cosh^2 u_0 - \cos^2 v}} \begin{pmatrix} \cosh mu_0 e^{-mu_0} \cos mv \\ \sinh mu_0 e^{-mu_0} \sin mv \end{pmatrix}, \\
\frac{A_0 (\cosh \tau_0 - \cos \sigma)}{a} \operatorname{senh} m\tau_0 e^{\mp m\tau_0} \operatorname{sen} m\sigma,$$

respectivamente.

5 Discusión.

En estas notas se han revisado las propiedades de vórtices estacionarios en fluidos incompresibles, incluyendo las ecuaciones de Euler que describen cuantitativamente las conexiones del campo de velocidad con el campo de vorticidad, y el campo de potencial vectorial de velocidad, así como la relación entre los dos últimos por medio de la ecuación de Poisson. Las soluciones de estas ecuaciones para vórtices en un plano se han construido usando bases de funciones armónicas en coordenadas circulares, elípticas y bipolares, ilustrando para el lector algunas de sus características comunes, y también sus diferencias asociadas a las geometrías respectivas.

Otros campos solenoidales, muy familiares en física, son el campo de inducción magnética, y sus campos asociados de potencial vectorial magnético y de distribución de corriente eléctrica como fuente. Las referencias [1,2] pueden ser útiles para el lector como ilustración de los campos y fuentes magnéticos armónicos esféricos en tres dimensiones, y circulares, elípticos y parabólicos en dos dimensiones, respectivamente. También constituyen un punto de comparación y analogía en la descripción de vórtices. Algunos de nuestros trabajos de investigación recientes [3] y en curso [4,5] están enfocados en la construcción de familias completas de vórtices armónicos sobre la superficie de una esfera, sobre un plano, y las conexiones entre ellos.

References

- E. Ley-Koo y A. Góngora T., El Desarrollo Multipolar por fuera y por dentro, Rev. Mex. Fis. 34, 1045 (1988).
- [2] A. Góngora T., E. Ley-Koo, M.A. Ortíz, Desarrollos Armónicos, bidimensionales en electrostática y magnetostática, Rev. Mex. Fis. 37, 759 (1991).
- [3] P. L. Rendón y E. Ley Koo, Vórtices Estacionarios sobre Superficies esféricas, y con Multipolaridad Definida. LV Congreso Nacional de Física (2012).
- [4] Eugenio Ley Koo y Pablo Rendón, Construcción Sistmática de Vórtices Armónicos Circulares y Bipolares, LVI Congreso Nacional de Física (2013).
- [5] Eugenio Ley Koo y Christian Esparza, Mapeos de Funciones Analíticas de Variable Compleja en un plano y de un plano a una superficie esférica, LVI Congreso Nacional de Física (2013)

La función dieléctrica macroscópica de sistemas estructurados: caso 1D

José Samuel Pérez Huerta¹, Guillermo Ortiz² y W. Luis Mochán³

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Zacatecas, Zac., México.

²Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, Argentina.

³Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, Cuernavaca, Mor., México.

17 de junio de 2014

Resumen

Desarrollamos un formalismo para el cálculo exacto y analítico de la respuesta dieléctrica macroscópica de un cristal fotónico unidimensional. La respuesta resulta ser no local, mostrando una dependencia en el número de onda k independiente de su dependencia en la frecuencia ω . Verificamos nuestros resultados explorando casos límites como el límite cuasiestático y comparamos nuestros resultados con resultados numéricos obtenidos de un formalismo aplicado a sistemas periódicos en cualquier número de dimensiones. A partir de la respuesta no local podemos calcular los modos propios del sistema empleando la relación de dispersión macroscópica. Comparamos éstos con las bandas fotónicas exactas, obtenidas con el formalismo de la matriz de transferencia, obteniendo un acuerdo excelente.

1. Introducción

La posibilidad de controlar fotones en forma análoga a los electrones en dispositivos electrónicos ha despertado un gran interés tanto en el ámbito tecnológico como en el de investigación básica. La tendencia hacia la miniaturización de dispositivos electrónicos y ópticos implica grandes retos tecnológicos y resolver ciertas limitaciones físicas. Por ejemplo, una pequeña apertura, menor a la longitud de onda, practicado en un material opaco transmite muy poca luz [1]. Aunque esta limitación es de un carácter fundamental, puede superarse recurriendo a fenómenos diversos. W. Ebbesen y colaboradores [2] hallaron una *transmisión extraordinaria de la luz* en arreglos periódicos de pequeños huecos practicados en una placa de plata. El mecanismo propuesto [2] es la transmisión mediada por los plasmones de superficie, los cuales son oscilaciones colectivas de carga [3] con longitudes de onda menores a los de la luz. Este nuevo fenómeno despertó un gran interés general en estas estructuras metálicas perforadas [4, 5, 6, 7]. Se ha encontrado que la transmisión extraordinaria ocurre también con microondas, para cuyas frecuencias los metales pueden considerarse conductores incapaces de sustentar plasmones de superficie. En este caso, es la red de huecos la que sostiene excitaciones anáologas a los plasmones, conocidas como *imitación de plasmón* [8, 9, 10]. Por otro lado, variando las condiciones se han hallado resultados opuestos, como una disminución importante en la transmisión de la luz a través de una placa metálica al practicarle huecos [11]. A este fenómeno se le conoce como supresión de la transmisión de la luz debido al fuerte acoplamiento entre los plasmones superficiales de ambas caras de la película [12, 13]. Estos ejemplos muestran la importancia de estudiar las propiedades ópticas de sistemas estructurados.

En éste trabajo desarrollamos una teoría macroscópica para estudiar las propiedades electromagnéticas de sistemas estructurados en una dimensión. Esta respuesta macroscópica o efectiva permite describir típicamente al sistema en escalas relativamente grandes de distancia, sin detallar explícitamente el comportamiento en pequeñas escalas, pero incorporando efectos relevantes del comportamiento microscópico. Determinar esta respuesta para un sistema arbitrario requiere incorporar fenómenos como son el esparcimiento múltiple [14, 15], la interacción electromagnética entre partículas vecinas y las variaciones abruptas de los campos en los diferentes medios de la estructura, entre otros. Aunque se han propuesto numerosas técnicas para calcular respuestas efectivas, muchas son aproximaciones con validez limitada, mientras que otras tienen un alto costo computacional.

La propagación de la luz en medios lineales homogéneos [16, 17, 18] está totalmente caracterizada por la respuesta electromagnética. Debido a que las frecuencias de resonancia magnéticas en sustancias típicas se hallan muy por debajo del rango visible, al estudiar la propagación de luz suelen ignorarse los efectos magnéticos y considerar al medio como no magnético, i.e. con permeabilidad $\mu = 1$ [19]. De este modo, la respuesta electromagnética del medio queda determinada por su función dieléctrica ϵ . Sin embargo, estructuras artificiales como los sistemas mencionados arriba presentan inhomogeneidades espaciales y su respuesta dieléctrica varía de una posición a otra. Otros ejemplos de sistemas inhomogéneos son las estructuras granuladas y los sistemas multicristalinos, en los que el comportamiento de las ondas electromagnéticas es complejo. Por ello el estudio de la propagación de la luz en estos medios ha sido objeto de muchas investigaciones [20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30].

Entre los medios estructurados en cuyo interior se ha estudiado la propagación de la luz, han ganado los medios artificiales *periódicos*, conocidos como *cristales fotónicos*. Estos se forman por la alternancia de dos materiales que pueden ser dieléctricos o metálicos [31]. Los metales son interesantes pues su respuesta dieléctrica depende de la frecuencia y pude cambiar de signo. Sin embargo, las componentes metálicas suelen presentar. Los cristales fotónicos fabricados exclusivamente de componentes dieléctricos han sido empleadas ampliamente, sobre todo por su baja disipación de energía [15, 32, 33, 34, 35, 36, 37]. Se han logrado fabricar cristales fotónicos dieléctricos una de cuyas componentes tiene permiti-


Figura 1: Ejemplos de sistemas estructurados. El lado izquierdo muestra un conjunto de anillos resonadores metálicos grabados en una placa aislante. El derecho muestra huecos perforados de manera periódica a través de una placa metálica.

vidades muy grandes, del orden de algunas centenas, en particular, para frecuencias en la región de microondas [38, 39]. Estas componentes permiten un elevado contraste entre las respuestas dieléctricas de las distintas componentes del sistema, lo cual lleva a comportamientos novedosos.

Además de los efectos de la transmisión y supresión extraordinaria de la luz, existen otros fenómenos interesantes en sistemas inhomogéneos. Podemos mencionar la localización de Anderson en medios desordenados [30, 40], la refracción negativa [41], el efecto Doppler inverso [42] y el camuflaje óptico [43] entre otros [44]. Estos fenómenos no se observan en medios naturales y solamente aparecen en sistemas estructurados con cierta *textura* espacial. Estos medios son con frecuencia llamados metamateriales, término que designa a aquellos materiales que presentan comportamientos electromagnéticos inusuales comparados con los materiales ópticos usuales [45]. Existen acepciones más restringidas y más amplias en la literatura; en nuestro trabajo llamaremos metamaterial a cualquier sistema estructurado formado por la alternancia de dos o más materiales.

Un tipo de metamaterial comúnmente implementado consiste de una matriz dieléctrica con incrustaciones metálicas, de una matriz metálica con incrustaciones dieléctricas, o una matriz de cualquier tipo con huecos como ilustramos esquemáticamente en la figura 1. Por ejemplo, el sistema de anillos resonadores a la izquierda de la fig. 1 consiste en placas aislantes sobre las cuales se han *dibujado* anillos conductores, como se suele hacer en los circuitos impresos. Este fue el primer sistema en que se demostró el fenómeno de la refracción negativa, la cual se obtuvo en la región de microondas [46]. Los anillos que ilustramos son dos anillos concéntricos que se han interrumpido en extremos opuestos. Cuando un campo magnético incide en los anillos metálicos, se induce una corriente en ellos y por lo tanto un dipolo magnético. Las interrupciones en los anillos forman un capacitor que ante la presencia de un campo eléctrico, genera una acumulación de carga entre sus "placas" dando origen a un dipolo eléctrico. Escogiendo de manera adecuada los parámetros de los anillos, se puede conseguir que la resonancia en la respuesta magnética y la resonancia en la respuesta dieléctrica se traslapen en la misma región espectral. Típicamente, las funciones respuesta cambian de signo al atravesar una resonancia, por lo cual, estos materiales tienen permitividad *efectiva* ϵ y permeabilidad efectiva μ negativas alrededor de sus resonancias. Veselago [47] predijo que en estas condiciones, una onda electromagnética incidente sería refractada en una dirección del lado opuesto a la normal a la superficie cuando la comparamos con la dirección de una onda refractada en las condiciones usuales. En estos materiales se cumple la ley de Snell, pero con un índice de refracción *negativo*.

En la literatura, existen varias propuestas para estudiar la propagación de una onda electromagnética en sistemas estructurados como los ejemplos que hemos mencionado. Una de las más conocidas es la técnica numérica de las diferencias finitas en el dominio del tiempo, conocida como FDTD [48, 49]. Otra propuesta es la aproximación de dipolo discreto, conocida como DDA, que sirve para estudiar la interacción de la luz con partículas de forma arbitraria [14, 50]. En esta aproximación, se modela una partícula de forma arbitraria como un conjunto de entidades puntuales polarizables cuya polarizabilidad se escoge de manera conveniente. La interacción electromagnética entre partes del sistema se reemplaza por una suma de interacciones dipolares. Mientras más entes polarizables se incluyan en el cálculo, más realista será el modelo del objeto que se desea estudiar.

Un conjunto de métodos alternativos a las propuestas anteriores lo constituyen las teorías de *medio efectivo* [29, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58]. Algunas de las propuestas sólo son válidas en ciertos casos límites: cuando la fracción de llenado de las inclusiones sea baja, cuando las partículas estén acomodadas en una red cúbica o cuando la longitud de onda sea mucho mayor que el tamaño de la celda unitaria. El propósito de las teorías de medio efectivo es describir al medio compuesto como si fuera un material homogéneo que responde al campo electromagnético mediante una *respuesta efectiva*. De hecho, cuando describimos las propiedades electromagnéticas de un material ordinario en términos de su permitividad y su permeabilidad solemos ignorar la textura espacial debida a la estructura atómica de la materia y reemplamos su respuesta por la de un medio efectivo homogéneo, lo cual solemos justificar argumentando que la longitud de onda de la luz es tan grande que no ve los detalles de la estructura microscópica del medio [52, 59, 53, 10].

Bajo el enfoque de las teorías de medio efectivo, se han propuesto en una variedad de trabajos la manera en cómo llevar a cabo el proceso de homogeneización de los materiales con estructura espacial [59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67], y se han discutido los límites de validez de dichas teorías [20, 68, 69].

En este trabajo estudiamos sistemas estructurados a lo largo de una dimensión mediante un enfoque de medio efectivo macroscópica. Nuestra motivación es la existencia de muchas formas conocidas de resolver el problema electromagnético en esta clase de sistemas, lo cual nos proporciona la posibilidad de validar los resultados de nuestra teoría macroscópica. En trabajos previos [70, 71] hemos desarrollado formalismos para el cálculo numérico de la respuesta macroscópica de metamateriales periódicos en cualquiér número de dimensiones. En el caso 1D podemos hacer simplificaciones adicionales que nos conducen a expresiones analíticas exactas. Nuestro propósito es validar estas expresiones y así ganar confianza en nuestro acercamiento general a esta clase de problemas.

En la sección 2 desarrollamos un formalismo para obtener la respuesta dieléctrica macroscópica de sistemas periódicos 1D. En la sección 3 aplicamos nuestro formalismo a un sistema modelo formado por dos dieléctricos no dispersivos alternados periódicamente, análizamos su comportamiento en algunos casos límites y comparamos los resultados con los de un formalismo numérico previamente desarrollado. En la sección 4 discutimos cómo calcular los modos propios electromagnéticos del sistema para cada vector de onda y en la sección 5 mostramos cómo obtener las bandas fotónicas completas del sistema a partir del formalismo macroscópico, comparando dichas bandas con resultados exactos derivados de un formalismo de matriz de transferencia. En la sección 6 desarrollamos una aproximación local, la cual conduce a una respuesta magnética aún en sistemas con componentes puramente dieléctricas, y exploramos los límites de validez de dicha aproximación. Finalmente, el la sección 7 presentamos nuestras conclusiones.

2. Sistema unidimensional

En un trabajo anterior [70, 71] obtuvimos una expresión para la respuesta dieléctrica macroscópica de un material estructurado en presencia de retardamiento, la cual se puede implementar numéricamente mediante un algoritmo recursivo eficiente. Para poner a prueba dicho procedimiento, es conveniente contar con un sistema cuya respuesta macroscópica pueda obtenerse de una manera muy sencilla y que nos permita poner a prueba nuestros resultados numéricos, además de sugerir el tipo de aplicaciones que podemos dar a nuestros resultados y los límites de validez de aproximaciones subsecuentes. Con tal propósito, estudiaremos un sistema periódico unidimensional y obtendremos una expresión analítica cerrada para su respuesta macroscópica. Ilustraremos la dispersión temporal y espacial que surge como consecuencia del retardamiento y mostraremos cómo del esquema macroscópico se puede hallar la estructura completa de bandas del sistema. Compararemos estos resultados analíticos con los obtenidos de la aplicación del método recursivo desarrollado en el capítulo previo y discutiremos el reemplazo de nuestro sistema dieléctrico no-local por un sistema local pero que tiene una respuesta magnética.

Tomemos el caso mas simple de un medio estructurado: una red periódica unidimensional, con invariancia a lo largo de las direcciones cartesianas x y y, formada por un material A, que ocupa la región $0 \le z \le L_A$ y un material B, que ocupa la región $L_A \le z \le L$ de tamaño L_B formando una celda unitaria que se repite periódicamente en la dirección zcon periodo $L = L_A + L_B$, como ilustramos en la figura 2. Supondremos que cada uno de estos materiales es no-magnético y tiene una respuesta dieléctrica bien definida ϵ_A y ϵ_B por lo cual la respuesta microscópica es $\epsilon(z) = \epsilon_A \text{ o } \epsilon_B$ dependiendo de z. Las fracciones de llenado de los medios A y B son $f_A = L_A/L$, $f_B = L_B/L$ respectivamente.



Figura 2: Panel izquierdo: Sistema en una dimensión que consiste en películas de cierto material con respuesta dieléctrica ϵ_A y ancho L_A alternadas periódicamente con películas de otro medio con respuesta dieléctrica ϵ_B y ancho L_B . Se muestran las coordenadas de las algunas interfaces y el periodo L de la red. Panel derecho: Se muestra la estructura y el sistema coordenado, así como la corriente externa **J** y su vector de onda **k**.

Consideremos una corriente *externa* \mathbf{J} dirigida en la dirección x y que se propaga como onda plana armónica en la dirección z con vector de onda \mathbf{k} , como ilustramos en el lado derecho de la figura 2. Nuestro objetivo es encontrar la respuesta del sistema a esta corriente.

Podemos hallar el campo eléctrico *microscópico* $E(z) = E^A(z)$ o $E^B(z)$ producido por esta corriente resolviendo la ecuación de onda con fuentes en cada una de las dos regiones y exigiendo que la solución obtenida sea una onda de Bloch con vector de Bloch **k** y que cumpla con las condiciones de contorno correspondientes a cada una de las interfaces. Una vez conocido el campo microscópico, podemos extraer de él la componente macroscópica para finalmente obtener la respuesta macroscópica del sistema.

Escribimos la dependencia espacial de la componente x de la corriente externa como $J(z) = J_0 e^{ikz}$, con J_0 la amplitud. La ecuación de onda inhomogénea en una dimensión para la componente x del campo eléctrico $E(z) = E^{\alpha}(z)$ con $\alpha = A, B$ es simplemente

$$\left(\epsilon_{\alpha} + \frac{1}{q^2} \frac{d^2}{dz^2}\right) E^{\alpha}(z) \equiv \hat{\mathcal{W}} E^{\alpha}(z) = \frac{4\pi}{i\omega} J_0 e^{ikz},\tag{1}$$

con $q=\omega/c$ y ω la frecuencia. Aquí introdujimos el operador de onda microscópico dado por

$$\hat{\mathcal{W}} \equiv \epsilon(z) + \frac{1}{q^2} \frac{d^2}{dz^2}.$$
(2)

La solución general,

$$E = \frac{4\pi}{i\omega}\hat{\mathcal{W}}^{-1}J,\tag{3}$$

de la ec. (1) es en cada medio la superposición de una solución particular y la solución general de la correspondiente ecuación homogénea. Entonces, en el intervalo $0 \leq z \leq L$ escribimos

$$E^{\alpha}(z) = E_0^{\alpha} e^{ikz} + E_D^{\alpha} e^{ik_{\alpha}z} + E_I^{\alpha} e^{-ik_{\alpha}z}, \qquad (4)$$

donde hemos introducido el vector de onda libre en la región α ,

$$k_{\alpha}^2 = \epsilon_{\alpha} q^2, \tag{5}$$

y donde E^{α}_{β} con $\beta = D, I$ son cuatro coeficientes por determinar correspondiendo a ondas libres que corren hacia la derecha (D) o hacia la izquierda (I) en el medio $\alpha = A, B$. El coeficiente

$$E_0^{\alpha} = \frac{4\pi\omega J_0}{ic^2(k_{\alpha}^2 - k^2)}$$
(6)

corresponde a una onda forzada que se propaga con el mismo vector de onda **k** que la corriente externa, y se puede obtener sustituyendo la ec. (4) en (1). De manera análoga, podemos escribir la componente y del campo magnético microscópico $B^{\alpha}(z)$ dentro del medio α y expresarla en términos de los coeficientes del campo eléctrico mediante la ley de Faraday,

$$B^{\alpha}(z) = E_0^{\alpha} \left(\frac{kc}{\omega}\right) e^{ikz} + \left(\frac{k_{\alpha}c}{\omega}\right) E_D^{\alpha} e^{ik_{\alpha}z} - \left(\frac{k_{\alpha}c}{\omega}\right) E_I^{\alpha} e^{-ik_{\alpha}z}.$$
 (7)

Las condiciones de continuidad para la componente tangencial del campo eléctrico y del campo magnético en las fronteras $z = L_A$ y z = L están dadas por los límites

$$E^{A}(z \to L_{A}^{-}) = E^{B}(z \to L_{A}^{+}), \qquad (8a)$$

$$R^{A}(z \to L^{-}) = R^{B}(z \to L^{+}) \qquad (8b)$$

$$B^{A}(z \to L_{A}^{-}) = B^{B}(z \to L_{A}^{+}), \tag{8b}$$

$$E^{A}(z \to L^{+}) = E^{B}(z \to L^{-}), \qquad (8c)$$

$$B^{A}(z \to L^{+}) = B^{B}(z \to L^{-}), \qquad (8d)$$

donde los superíndices \pm indican si nos acercamos a la superficie por la derecha (+) o por la izquierda (-). Notamos que las ecs. (4) describen al campo únicamente en el intervalo $0 \le z \le L$, por lo cual no podemos emplearla en el lado derecho de las ecs. (8c) y (8d). Sin embargo, el teorema de Bloch nos dice que en un medio periódico al avanzar un periodo L hacia la derecha, todos los campos adquieren simplemente una fase

$$E^{A}(z \to L^{+}) = E^{A}(z \to 0^{+})e^{ikL},$$
 (9a)

$$B^{A}(z \to L^{+}) = B^{B}(z \to 0^{+})e^{ikL},$$
 (9b)

lo cual nos permite cerrar el sistema de ecuaciones (8a)-(8d). Sustituyendo en ellas la ec. (4), las expresamos como cuatro ecuaciones inhomogéneas acopladas con cuatro incógnitas, las cuales escribimos como

$$\begin{pmatrix} e^{ik_{A}L_{A}} & -e^{ik_{B}L_{A}} & e^{-ik_{A}L_{A}} & -e^{-ik_{B}L_{A}} \\ k_{A}e^{ik_{A}L_{A}} & -k_{B}e^{ik_{B}L_{A}} & -k_{A}e^{-ik_{A}L_{A}} & +k_{B}e^{-ik_{B}L_{A}} \\ 1 & -e^{i(k_{B}-k)L} & 1 & -e^{-i(k_{B}+k)L} \\ k_{A} & -k_{B}e^{i(k_{B}-k)L} & -k_{A} & k_{B}e^{-i(k_{B}+k)L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{D}^{A} \\ E_{D}^{B} \\ E_{I}^{A} \\ E_{I}^{B} \end{pmatrix}$$
$$= \Delta E_{0} \begin{pmatrix} e^{ikL_{A}} \\ ke^{ikL_{A}} \\ 1 \\ k \end{pmatrix} (10)$$

donde $\Delta E_0 = E_0^B - E_0^A$.

Siendo una onda de Bloch, el campo eléctrico no es una función periódica en z, pero $E(z)e^{-ikz}$ sí lo es. Entonces podemos expandir esta función como una serie de Fourier,

$$E(z)e^{-ikz} = \sum_{G} E_G e^{iGz},$$
(11)

con números de onda G son múltiplos enteros de $2\pi/L$ y con coeficientes

$$E_G = \frac{1}{L} \int_0^L E(z) e^{-i(k+G)z} dz.$$
 (12)

Introduciendo un *filtrado* en el espacio recíproco como realización del *promedio* espacial, identificamos el campo eléctrico macroscópico como el término G = 0 de dicha serie de Fourier, $E^M(z) \equiv E_{G=0}e^{ikz}$. Por otro lado, promediando la ec. (3) escribimos

$$E^{M} = \frac{4\pi}{i\omega} \mathcal{W}_{M}^{-1} J^{M}, \qquad (13)$$

donde hemos indentificado a la corriente externa J con la corriente externa macroscópica J^M , pues no tiene fluctuaciones espaciales derivadas de la textura del metamaterial, y hemos introducido el operador de onda macroscópico \mathcal{W}_M . Por analogía con la ec. (2), escribimos

$$\mathcal{W}_M = \epsilon^M(\omega, k) - (k/q)^2, \tag{14}$$

en términos de la respuesta dieléctrica macroscópica transversal $\epsilon^{M}(\omega, k)$.

Finalmente, sustituimos las expresiones (4) en la ec. (12) y la evaluamos en G = 0 para identificar E_M , \mathcal{W}_M y finalmente, la respuesta macroscópica

$$\epsilon^{M}(\omega,k) = (kc/\omega)^{2} + \frac{4\pi J_{0}L}{i\omega} / (L_{A}E_{0}^{A} + L_{B}E_{0}^{B} + E_{D}^{A}L_{A}\operatorname{sinc}((k_{A} - k)L_{A}/2)e^{i(k_{A} - k)L_{A}/2} + E_{I}^{A}L_{A}\operatorname{sinc}((k_{A} + k)L_{A}/2)e^{-i(k_{A} + k)L_{A}/2} + E_{D}^{B}L_{B}\operatorname{sinc}((k_{B} - k)L_{B}/2)e^{i(k_{B} - k)L_{B}/2} + E_{I}^{B}L_{B}\operatorname{sinc}((k_{B} + k)L_{B}/2)e^{-i(k_{B} + k)L_{B}/2})$$
(15)

donde $\operatorname{sinc}(x) \equiv \operatorname{sin}(x)/x$. Lo único que resta es sustituir en la ec. (15) los coeficientes E_0^{α} dados por la ec. (6) y los coeficientes E_{β}^{α} dados por la solución de la ec. (10).

El resultado (15) para la función macroscópica es *exacto* en el sentido que no se ha realizado ninguna aproximación para obtenerlo, y es analítico al estar expresado en términos de funciones analíticas y de la solución de un sistema de ecuaciones pequeño que puede resolverse explícitamente, aunque las expresiones resultantes sean tediosas.

Debemos hacer notar que la respuesta macroscópica (15) depende explícitamente del vector de onda k además de ser una función de la frecuencia ω .

3. Ejemplo

En esta sección, estudiamos como ejemplo a un sistema hecho con materiales transparentes no dispersivos, cuyas constantes dieléctricas elegimos como $\epsilon_A = 1$ y $\epsilon_B = 12$, y con fracciones de llenado iguales $f_A = f_B = 0.5$. Obtenemos $\epsilon^M(\omega, k)$ simplemente sustituyendo los valores anteriores en la ec. (15). En la fig. 3 mostramos el resultado, el cual ilustra explícitamente la dispersión temporal de ϵ^M , i.e., su dependencia en ω , y su dispersión espacial o no localidad, i.e., su dependencia en k. Notamos que podemos variar a k independientemente de ω , pues ambos están definidos por la elección arbitraria de la dependencia espacial y temporal de la corriente externa.

Dado que en este ejemplo los materiales son no dispersivos, la dispersión temporal y espacial de la respuesta macroscópica surge como consecuencia del retardamiento únicamente, i.e., de la razón entre la longitud de onda de la luz y los tamaños de las componentes. La función $\epsilon^M(\omega, k)$ muestra una serie de polos simples, algunos de los cuales convergen entre sí cuando $k \to 0$. La presencia de singularidades en la respuesta en esta caso está ligada a resonancias en las reflexiones múltiples en cada película y en cada periodo del material, análogas a las resonancias de Fabry-Perot, y aparecen a frecuencias relativamente grandes, en las que la frecuencia ω y/o el número de onda normalizado kc son del orden de la frecuencia natural c/L que caracteriza la propagación de la luz en un periodo del sistema. En los polos, el operador de onda \mathcal{W}_M diverge y de la ec. (13) concluimos que el campo eléctrico macroscópico se anula aún en presencia de una corriente externa no nula, es decir, corresponde a un apantallamiento perfecto.

Podemos verificar en la figura que en el límite estático ($\omega \ll c/L$) y para longitud de onda larga ($k \to 0$) la respuesta macroscópica transversal del sistema es el promedio simple de las constantes dieléctricas, $\epsilon^M(\omega, 0) =$ $\epsilon^M(0,0) = f_A \epsilon_A + f_B \epsilon_B$. Esto obedece a que las componentes del campo eléctrico tangenciales a cada superficie son contínuas al atravesar éstas y a que en este límite el campo es constante dentro de cada película. Podemos verificar que nuestro cálculo toma este valor, dado por $\epsilon^M(0,0) = 6.5$ en nuestro ejemplo.

Nuestros resultados muestran además que en el límite estático $\epsilon^M(\omega, k) = \epsilon^M(\omega, 0)$ independientemente de k siempre y cuando $qL \ll 1$. Podemos entender este comportamiento de la siguiente manera: Empezamos por escribir al operador de onda en bloques de la forma

$$\hat{\mathcal{W}} = \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{W}}_{pp} & \hat{\mathcal{W}}_{pf} \\ \hat{\mathcal{W}}_{fp} & \hat{\mathcal{W}}_{ff} \end{pmatrix}, \tag{16}$$

donde $\hat{\mathcal{W}}_{pp}$ es aquella parte que acopla promedios con promedios, $\hat{\mathcal{W}}_{pf}$ acopla fluctuaciones con promedios, etc. De la identidad $\hat{\mathcal{W}}^{-1}\hat{\mathcal{W}} = \hat{1}$ es fácil obtener el elemento pp de la inversa

$$\hat{\mathcal{W}}_{M}^{-1} = (\hat{\mathcal{W}}^{-1})_{pp} = (\hat{\mathcal{W}}_{pp} - \hat{\mathcal{W}}_{pf} (\hat{\mathcal{W}}_{ff})^{-1} \hat{\mathcal{W}}_{fp})^{-1},$$
(17)

donde debemos cuidar el orden en que realizamos las proyecciones y las inversiones. Usando la definición (14) y representando los operadores en



Figura 3: Representación en tonos de grises de la respuesta dieléctrica macroscópica $\epsilon^M(\omega, k)$ del sistema periódico unidimensional mostrado en la figura 2 con $\epsilon_A = 1$, $\epsilon_B = 12$ y $f_A = f_B = 0.5$ como función de la frecuencia normalizada $\omega L/c$ y del vector de onda normalizado kL. Se muestran algunos contornos a lo largo de los cuales ϵ^M es constante (líneas sólidas) y las posiciones de los polos (líneas a trazos). Las regiones blancas corresponden a valores fuera del rango $\sim (-5, 15)$ elegido para obtener un contraste conveniente.

el espacio recíproco,

$$\frac{1}{\epsilon^{M}(\omega,k) - \frac{k^{2}}{q^{2}}} = \left(\epsilon_{00} - \frac{k^{2}}{q^{2}} - \sum_{GG'} \epsilon_{0G}(\tilde{\mathcal{W}}^{-1})_{GG'} \epsilon_{G'0}\right)^{-1}, \quad (18)$$

donde $\tilde{\mathcal{W}}_{GG'}$ es la matriz que obtenemos a partir de $\mathcal{W}_{GG'}$ eliminando el renglón G = 0 y la columna G' = 0, i.e., dejando únicamente los términos fluctuantes. A partir de su definición, escribimos

$$\tilde{W}_{GG'} = \epsilon_{GG'} - \frac{(k+G)^2}{q^2} \delta_{GG'} \approx -\frac{(k+G)^2}{q^2} \delta_{GG'}, \quad G, G' \neq 0, \quad (19)$$

donde supusimos que la frecuencia es baja en términos de la frecuencia caracteristica asociada a una estructura de periodo L, i.e., $qL \ll 1$. En este caso, $G/q \gg 1$ para todos los vectores recíprocos no nulos. Sustituyendo en la ec. (18) obtenemos

$$\frac{1}{\epsilon^M(\omega,k) - \frac{k^2}{q^2}} \approx \frac{1}{\epsilon_{00} - \frac{k^2}{q^2} - \sum_G' \frac{q^2}{(k+G)^2} |\epsilon_{G0}|^2},$$
 (20)

de donde obtenemos finalmente $\epsilon^M(\omega, k) \approx \epsilon_{00} = f_A \epsilon_A + f_B \epsilon_B$ al orden más bajo en $(qL)^2$. Debido a esto, a frecuencias bajas no hay dispersión espacial ni temporal y la respuesta transversal es el simple promedio de las funciones dieléctricas de las componentes pesadas por su fracción de llenado.



Figura 4: Respuesta macroscópica $\epsilon^M(\omega, k)$ del sistema unidimensional mostrado en la figura 2 como función de la frecuencia normalizada $\omega L/c$ para un vector de onda fijo $k = \pi/2L$. La línea sólida corresponde al cálculo analítico y los diamantes corresponden a resultados obtenidos con un esquema recursivo de Haydock con retardamiento [70].

En esta deducción usamos el hecho de que en una superred unidimensional y para propagación a lo largo del eje de la estructura, no hay acoplamiento entre campos longitudinales y transversales y por ello el campo (que es transversal en nuestro ejemplo) no tiene fluctuaciones, o más bien, sus fluctuaciones son pequeñas, del orden de $(qL)^2$. En el caso genérico en 2D y en 3D habría fluctuaciones pero dominadas por campos de caracter longitudinal acoplados con el campo macroscópico, los cuales conducirían a efectos de campo local aún para ondas transversales a bajas frecuencias.

Finalizamos esta sección mencionando que en nuestra deducción de la ec. (15) no empleamos la condición $kL \ll 1$. El haber escogido el filtrado en el espacio de Fourier como procedimiento para promediar los campos, en lugar de emplear un promedio espacial simple sobre la celda unitaria, nos permite usar nuestra teoría aún para vectores de onda grandes, del orden del inverso del tamaño de la celda unitaria. La figura 4 muestra $\epsilon^M(\omega, k)$ para para un valor fijo de $k = \pi/2L$. Notamos, como en la figura 3, la fuerte dependencia de la repuesta macroscópica con la frecuencia (dispersión temporal) aún cuando las componentes del sistema no dependan de la frecuencia y sean reales. También vemos explícitamente el desarrollo de una serie de singularidades como función de la frecuencia. Hemos incluido en la figura los resultados de un cálculo numérico empleando el formalismo presentado en las Refs. [70, 71], los cuales están en excelente

acuerdo con nuestro cálculo analítico. Debemos recordar que en sistemas bi y tridimensionales no contamos con un método analítico exacto, por lo cual es importante validar nuestros métodos numéricos en este caso 1D en que sí los hay.

4. Modos propios

Una aplicación de la respuesta macroscópica de sistemas estructurados se halla en el cálculo de los los modos propios electromagnéticos del sistema a partir de la relación de dispersión macroscópica. En la figura 5 mostramos la respuesta dieléctrica macroscópica del mismo sistema unidimensional de la sec. 3 como función de ω para vectores de onda k = 0y $k = 2\pi/L$ en el centro de la primera y de la segunda zona de Brillouin, respectivamente. La frecuencia de los modos propios electromagnéticos transversales del sistema, $\omega(k)$, puede obtenerse de la relación de dispersión $k^2 = q^2 \epsilon^M(\omega, k); \, \omega(k)$ corresponde geométricamente a la intersección de la hipérbola cúbica $(k/q)^2$ con la función $\epsilon^M(\omega,k),$ donde de nuevo abreviamos $q = \omega/c$. Conforme $k \to 0$, $(k/q)^2$ tiende hacia una recta vertical en el eje de las ordenadas unida a una recta horizontal en el eje de las abscisas. La figura indica con círculos los lugares donde ésta intersecta a la función dieléctrica. Sobre la misma gráfica, mostramos con línea punteada roja la función macroscópica que corresponde a un vector de onda pequeño k = 0.1/L, la cual es muy parecida a la respuesta macroscópica con k = 0 excepto alrededor de la zona cercana a $qL \approx 2.3$, en la cual aparece un polo nuevo arriba del cual hay un cero, situado aproximadamente en $\omega \approx 2.3c/L$. En el panel inferior de la fig. 5 mostramos la respuesta macroscópica en el centro de la segunda zona de Brillouin $k = 2\pi/L$ y la hipérbola cúbica $(k/q)^2$ correspondiente. Indicamos con círculos los lugares donde éstas dos funciones se intersectan.

En el panel superior hallamos una eigenfrecuencia en $\omega = 0$, la cual designamos con el numeral romano I. En el panel inferior no es evidente esta eigenfrecuencia, aunque aparece una intersección cercana cuando empleamos un vector de onda k que difiere un poco de $2\pi/L$, y para el cual aparece un polo en $\epsilon^M(\omega, k)$ muy cercano a $\omega = 0$. La intersección de esta curva con $(k/q)^2$ para k pequeño queda fuera de la gráfica, pero es evidente que sucede a una frecuencia $\omega \approx 0$ y que ésta tiende a cero cuando $k \to 0$. En el panel superior aparece otro modo cerca de $\omega = 3.27 c/L$, indicado con el numeral III, el cual también aparece a la misma frecuencia en el panel inferior. Finalmente, en el panel inferior aparece un modo con frecuencia cercana a $\omega = 2.30c/L$, el cual indicamos con el numeral II, mientras que en el panel superior la función dieléctrica parece no cruzar al eje de las abscisas en esta frecuencia. Sin embargo, al variar muy poco el vector de onda $k \approx 0$ se desarrolla un nuevo polo en el panel superior muy cercano al polo inicial situado alrededor de 2.4c/L, y aparece un cero de la función dieléctrica cerca de la frecuencia esperada.

El comportamiento de la función macroscópica cerca de $\omega \approx 2.30c/L$ y para valores de $k \approx 0$ parece muy peculiar. Para estudiarlo con mayor detalle, en la figura 6 mostramos un rango más estrecho de frecuencias en dicha región para dos vectores de onda pequeños pero distintos de cero



Figura 5: Respuesta dieléctrica macroscópica $\epsilon^M(\omega, k)$ del sistema unidimensional mostrado en la figura 2 como función de la frecuencia normalizada $\omega L/c$ para los vectores de onda k = 0 (arriba) y $k = 2\pi/L$ (abajo). Arriba se muestra la hipérbola cúbica degenerada lím_{k→0} $(kc/\omega)^2$ (ver texto) mediante trazos largos. Se muestran con círculos los lugares donde ésta intersecta la gráfica de la función dieléctrica $\epsilon^M(\omega, 0)$: las eigenfrecuencias del sistema cuando k = 0. También se muestra con línea de trazos cortos la respuesta macroscópica para un vector de onda pequeño k = 0.1/L, la cual cruza por cero en $\omega \approx 2.3c/L$. Abajo se muestra con trazos largos la hipérbola cúbica $(k/q)^2$ para $k = 2\pi/L$. Las frecuencias en que ésta intersecta a la respuesta macroscópica $\epsilon(\omega, 2\pi/L)$ son las eigenfrecuencias del sistema en el centro de la segunda zona de Brillouin y se indican con círculos. También se muestra con línea punteada la respuesta macroscópica para un vector de onda $k = (2\pi - 0.1)/L$ cercano.



Figura 6: Respuesta dieléctrica macroscópica del sistema unidimensional mostrado en la figura 2 para tres valores de k cercanos a cero: 0 (línea continua negra), 0.1/L (trazos cortos rojos) y 0.01/L (trazos largos magentas).

k = 0.1/L y k = 0.01/L, además del caso k = 0. La función dieléctrica alrededor de $\omega = 2.30c/L$ es continua cuando k = 0, pero con una minúscula modificación a k aparece un polo cuyo peso aumenta y cuya posición se desplaza hacia el rojo al incrementar k. La intersección del cero que sigue a este polo con el eje de las abscisas, indicado por un círculo en la figura 6, se halla en una frecuencia muy cercana a la frecuencia designada por el numeral romano II en la figura 5, y tiende a ella conforme $k \to 0$, aunque dicha intersección desaparece cuando se alcanza el valor k = 0. Por otro lado, podemos adivinar de la figura 5 que el desplazamiento al rojo del polo continúa conforme k continúa creciendo y conforme $k \to 2\pi/L$ su posición se sitúa hasta $\omega \to 0$, aunque el polo colapsa en $\omega = 0$. Como vemos, todos los modos correspondientes a $k \to 0$ y a $k \to 2\pi/L$ coinciden entre sí, aunque su acoplamiento con el campo macroscópico varía y algunos de ellos pueden ausentarse del cálculo macroscópico en los límites k = 0 o $k = 2\pi/L$. Más adelante discutiremos la comparación entre modos cuyos vectores de onda difieren por un vector recíproco de la superred.

En la figura 7 mostramos la respuesta macroscópica del mismo sistema unidimensional de la sec. 3 como función de ω para otros vectores de onda, $k = \pi/2L$ como en la fig. 4 y para $k = \pi/L$, en el borde de la zona de Brillouin. En las gráficas también mostramos las hipérbolas cúbicas correspondientes y hemos utilizado numerales romanos para etiquetar sus intersecciones con $\epsilon^M(\omega, k)$. Estas intersecciones corresponden a los modos normales del sistema para dichos vectores de onda.

En esta sección hemos ilustrado cómo para cada vector de onda podemos obtener las frecuencias de los modos normales electromagnéticos



Figura 7: Respuesta macroscópica $\epsilon^M(\omega, k)$ del sistema mostrado en la figura 2 como función de ω para vectores de onda $k = \pi/2L$ (arriba) y $k = \pi/L$ (abajo). En ambos casos mostramos las hipérbolas cúbicas $(k/q)^2$ correspondientes (trazos largos) e indicamos con círculos y etiquetamos con numerales romanos sus intersecciones con $\epsilon^M(\omega, k)$, cuyas frecuencias corresponden a modos normales del sistema.

correspondientes a partir de la solución de la relación de dispersión macroscópica, la cual corresponde a la ecuación de onda en un medio efectivo homogéneo que muestra dispersión espacial además de dispersión temporal. Para cada vector de onda puede haber varias frecuencias, lo cual está asociado a la presencia de varios polos en la respuesta dieléctrica macroscópica, aún en el ejemplo aquí desarrollado en el cual los componentes de nuestro metamaterial son no dispersivos y transparentes. En la siguiente sección estudiaremos sistemáticamente la dependencia de estas frecuencias en el vector de onda. Debemos notar que no sólo las posiciones, sino también los pesos de los polos de los que se originan los diversos modos dependen de k, por lo cual ciertos modos parecen desaparecer para algunos vectores de onda específicos.

5. Estructura de bandas

La propagación de ondas electromagnéticas sin fuentes, así como la propagación de cualquier otro tipo de excitaciones en un sistema periódico, puede describirse a partir de un esquema de bandas. Así como sucede a los electrones en un sólido cristalino, la energía, o equivalentemente , la frecuencia de los modos propios del sistema, son funciones del ímpetu, o equivalentemente, de su vector de onda. En el caso de una estructura periódica en una dimensión construida mediante la alternancia de películas delgadas homogéneas, es posible obtener la estructura de bandas fotónicas de manera analítica a partir de la *matriz de transferencia* que relaciona a los campos eléctrico a través de un periodo de la estructura. Para un sistema de dos componentes, ésta conduce a la relación de dispersión [22, 72]

$$\cos(kL) = \cos(\sqrt{\epsilon_A}\omega L_A/c)\cos(\sqrt{\epsilon_B}\omega L_B/c) - \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\epsilon_A}{\epsilon_B}} + \sqrt{\frac{\epsilon_B}{\epsilon_A}}\right)\sin(\sqrt{\epsilon_A}\omega L_A/c)\sin(\sqrt{\epsilon_B}\omega L_B/c).$$
(21)

Por otro lado, hemos visto en la sección 4 que la relación de dispersión para los modos transversales pueden obtenerse a partir de la relación de dispersión de un medio efectivo

$$(k/q)^2 = \epsilon^M(\omega, k), \tag{22}$$

con $q = \omega/c$, i.e., para cada k, aquellas frecuencias $\omega_n(k)$ donde la hipérbola cúbica $(k/q)^2$ se cruza con la respuesta macroscópica $\epsilon^M(\omega, k)$ son las frecuencias de los *modos normales* del sistema, como ilustramos en las figuras 5-7 para valores específicos del vector de onda. Repetiendo dicho procedimiento para otros vectores de onda podemos construir toda la estructura de bandas fotónicas, como ilustramos en la figura 8.

En el rango de frecuencias que mostramos en la figura 8, obtenemos tres bandas $\omega_n(k)$ con n = I, II y III. La comparación entre el cálculo macroscópico y el cálculo vía la matriz de transferencia muestran un excelente acuerdo a todo lo largo de la banda, excepto en ciertos puntos aislados, como discutiremos a continuación.



Figura 8: Relación de dispersión analítica obtenida de la ec. (21) (línea sólida). Indicamos con círculos los modos obtenidos en la sección anterior empleando la relación de dispersión macroscópica y con diamantes otros puntos obtenidos mediante el mismo procedimiento empleando otros números de onda.

De acuerdo a la figura 5, en el centro k = 0 de la primera zona de Brillouin se pierde el modo II en el cálculo macroscópico, aunque se recupera para vectores de onda cercanos. El motivo por el cual este modo se pierde para k = 0 es que nuestro cristal unidimensional es *centrosimétrico*. Una inversión cambia al vector de onda $k \to -k$ pero deja invariante al centro k = 0 de la zona de Brillouin. Por lo tanto, los modos con k = 0son eigenmodos del operador de inversión, i.e., son *pares* o *impares*. Los modos impares *promedian a cero* y por tanto no contribuyen al campo macroscópico y no se acoplan a una excitación externa consistente en una onda plana con vector de onda k = 0. Más generalmente, un modo electromagnético que tenga simetría impar, no se puede acoplar a una excitación par ni viceversa [73], y por lo tanto, no podría obtenerse inmediatamente con nuestro formalismo macroscópico. Tal es el caso del modo II con k = 0.

Sin embargo, la misma figura 5 muestra que podemos obtener sin problema alguno el modo II con la frecuencia correcta si consideramos un vector de onda en el centro $k = 2\pi/L$ de la segunda zona de Brillouin. Esto se debe a que los modos con k finita ya no son eigenmodos del operador de inversión. Recordemos que en un sistema periódico, las frecuencias $\omega_n(k)$ de los modos propios son funciones periódicas de k con el periodo de la red recíproca, es decir, $\omega_n(k) = \omega_n(k+G)$ para cualquier vector recíproco G, lo cual nos permite obtener $\omega_{II}(k=0)$ ja partir de nuestra formulación macroscópica con $k = 2\pi/L!$

Puede parecer extraño el uso de una teoría macroscópica con un vector

de onda k fuera de la primera zona de Brillouin. A este respecto, notamos que hemos definido nuestros campos macroscópicos a través de un proyector promedio que filtra todos los vectores recíprocos G no nulos. Aunque parece natural esperar que este procedimiento deje pasar únicamente vectores de onda k dentro de la primera zona de Brillouin, nada en nuestro formalismo impide que el vector k del campo macroscópico esté fuera de la primera zona de Brillouin; podríamos haber iniciado nuestro cálculo con una corriente externa que tuviera más de una oscilación en cada celda unitaria. En este caso, los campos fluctuantes serían aquellos con un número de oscilaciones distinto, acoplados a la perturbación externa a través de la textura del material, aunque dicho número de fluctuaciones podría ser tanto mayor como menor al de la perturbación. Recordamos que las ondas de Bloch son una suma de ondas planas, y podemos tomarnos la libertad de tomar a cualquiera de ellas como la representante macroscópica del campo. El precio a pagar por esta libertad es que perdemos la noción intuitiva común del concepto de macroscópico, como aquella componente del campo microscópico que oscila espacialmente con más lentitud que todas las demás. Sin embargo, seguimos pudiendo interpretar al campo macroscópico como aquel que tiene el mismo vector de onda que la corriente externa y podemos emplear esta libertad para sobreponernos de las limitaciones que podría imponernos la simetría.

Una forma de entender esta forma de extender nuestro cálculo sería sí limitándonos a vectores k dentro de la primera zona de Brillouin, pero interpretando a $k + G_0$ como el vector de onda macroscópico, donde G_0 es un vector recíproco específico, pero arbitrario. Entonces, los modos estarán dados por la solución de la relación de dispersión macroscópica modificada

$$\epsilon^M(\omega, k + G_0) = \left(\frac{k + G_0}{q}\right)^2.$$
(23)

De manera similar, notamos en la fig. 5 que al escoger $k = 2\pi/L$ perdemos el modo I con frecuencia $w_I(k \to 2\pi/L) = 0$. Podemos explicar esto fácilmente, notando que cuando k = 0, la ecuación de onda $(k+G)^2 E_G = q^2 \sum_{G'} \epsilon_{G-G'} E'_G$ tiene una solución q = 0 ($\omega = 0$), con coeficientes $E_G = 0$ para todos los vectores recíprocos no nulos $G \neq 0$, mientras que para G = 0, E_0 es arbitrario. Entonces, en nuestro sistema unidimensional, el límite $k \to 0$, $\omega \to 0$ corresponde a un campo que no varía en el espacio y por lo tanto, es un modo que no se acopla a vectores recíprocos finitos como $G = 2\pi/L$. Es por ello que no podemos hallar dicho modo si iniciamos el cálculo macroscópico con un vector de onda $k = 2\pi/L$, pero una translación en el espacio recíproco que nos lleve al centro de la primera zona de Brillouin nos permite hallar el modo fácilmente.

La libertad de transladar los vectores de onda por vectores recíprocos puede ser de utilidad al estudiar las bandas fotónicas en sistemas de mayor dimensionalidad y con otras simetrías.

En esta sección vimos cómo la estructura de bandas fotónicas en un sistema unidimensional se puede reproducir de manera *exacta* con nuestro formalismo macroscópico siempre y cuando incorporemos en el cálculo los efectos de retardamiento, los cuales conducen a dispersión temporal y a no localidad, aún en sistemas cuyas componentes sean transparentes y no dispersivas. Desde luego, en este caso es más económico obtener las bandas directamente de la fórmula analítica 21 obtenida del formalismo de matrices de transferencia. Sin embargo, para sistemas de mayor dimensionalidad, no disponemos de dichas fórmulas analíticas [39, 66, 67, 71, 74].

6. Aproximación local y respuesta magnética

La no localidad en la respuesta dieléctrica macroscópica puede interpretarse bajo ciertas condiciones en términos de una respuesta magnética efectiva local del sistema [75, 76]. Podemos encontrar ésta simplemente expandiendo la ec. (22) en una serie de Taylor a segundo orden para vectores de onda k pequeños

$$k^{2} = q^{2} \epsilon^{M}(\omega, k) \approx q^{2} \left(\epsilon^{M}(\omega, 0) + \frac{k^{2}}{2} \frac{\partial^{2} \epsilon^{M}(\omega, 0)}{\partial k^{2}} + \cdots \right).$$
(24)

El término lineal de la expansión no aparece en sistemas con simetría bajo inversión temporal (por ejemplo, en ausencia de campos magnéticos externos), ya que en ellos la respuesta macroscópica debe ser invariante frente al cambio $k \to -k$. De la ec. (24) podemos despejar

$$k^2 \approx q^2 \epsilon^M(\omega) \mu^M(\omega), \tag{25}$$

que es la relación de dispersión usual para los modos transversales en un medio homogene
olocal con permitividad $\epsilon^M(\omega) = \epsilon^M(\omega, 0)$ y permeabilidad [58]

$$\mu^{M}(\omega) = \frac{1}{1 - \frac{q^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \epsilon^M(\omega, k = 0)}.$$
(26)

Notamos que aún cuando las componentes de la estructura sean no magnéticas, la no localidad de la función $\epsilon^M(\omega, k)$ implica que el sistema macroscópico puede tener una respuesta magnética $\mu(\omega) \neq 1$, i.e., el magnetismo puede surgir de la no localidad [77, 17] la cual en nuestro cálculo surge del retardamiento.

Podemos hacer un cálculo aproximado de las relaciones de dispersión de las ondas transversales de nuestra estructura 1D a partir de la permitividad y la permeabilidad local. Esperamos que esta aproximación sólo sea válida para vectores de onda pequeños apra los que valga la expansión (24). En la figura 9 mostramos las bandas calculadas bajo el esquema local aproximado para el mismo sistema que el discutido en la sección 3 junto con las bandas obtenidas de la relación de dispersión exacta. También mostramos la función dieléctrica macroscópica local $\epsilon^M(\omega)$ y la permeabilidad macroscópica $\mu^M(\omega)$. Observamos que para valores pequeños $\omega < c/L$ la permeabilidad es cercana a 1, es decir, nuestro sistema no muestra efectos magnéticos. Sin embargo, al aumentar ω , μ^M se incrementa y aproximadamente en $\omega = 1.5c/L$ tiene un polo, correspondiente a un cero en el denominador de la ec. (26), $q^2(\partial^2/\partial k^2)\epsilon^M(\omega,0) = 2$. Para frecuencias ligeramente superiores, ϵ^M es aún positiva pero μ^M se vuelve negativa, por lo cual el sistema se vuelve opaco. Esta es la contraparte local de la brecha



Figura 9: (a) Relación de dispersión local para el mismo sistema mostrado en la figura 2 (línea sólida) obtenida de la ec. (25) y relación de dispersión exacta (línea a trazos). (b) Función dieléctrica macroscópica local $\epsilon^M(\omega)$. (c) Respuesta macroscópica magnética $\mu^M(\omega)$ (línea solida) y detalle escalado $3 \times 10^4 \mu^M(\omega)$ veces (línea a trazos y puntos azul).

fotónica que muestra el cálculo exacto cuando $\omega L/c \approx 1$. Claro que no esperamos que la aproximación local sea adecuada para vectores k grandes, cerca o más allá del borde de la zona de Brillouin. Como muestra la figura 6, cerca de $\omega \approx 2.3c/L$, $\epsilon^M(\omega, k)$ tiene un polo para $k \approx 0$, aunque este polo desaparece cuando k = 0 exactamente. Por lo tanto, las derivadas de ϵ^M con respecto a k divergen a dicha frecuencia y μ^M tiene un cero, arriba del cual toma un valor positivo. Es por ello que la aproximación local predice una banda de modos que se pueden propagar con $k \approx 0$ y $\omega \approx 2.3 c/L$. Esto corresponde con el tope de la banda II de la figura 8. Sin embargo, a una frecuencia ligeramente superior $\epsilon^M(\omega, 0)$ tiene un polo tras el cual cambia de signo. En este polo, μ^M tiene un cero doble, de manera que el producto $\epsilon^M \mu^M$ toma el valor 0 y la banda se regresa al valor k = 0. Este regreso no aparece en la relación de dispersión exacta. Arriba de este polo, ϵ^M es negativa y μ^M es positiva, por lo que aparece otra brecha prohibida que se extiende hasta $\omega \approx 3.35 c/L$ en que ϵ^M tiene un cero. Ahí comienza la banda III que de nuevo es bien descrita por la aproximación local. Notamos que la aproximación local sin introducir la respuesta magnética sería incapaz de describir la banda III.

Hemos mostrado que las bandas $I ext{ y III}$ son bien descritas, sobre todo en la región de vectores de onda pequeños, por la aproximación local, siempre y cuando introduzcamos la permeabilidad magnética. En cambio, la banda II queda descrita bastante pobremente. Su borde es correctamente predicho, pero la aproximación local no conduce a una dispersión negativa y en cambio predice un regreso que no aparece en la banda original. El motivo de estas fallas proviene del hecho de que μ^M es cercana a cero alrededor de las singularidades de $\epsilon^M(\omega, k)$ cerca de las cuales es dudosa la validez de nuestra expansión de Taylor (24). En resumen, la aproximación local parece ser razonable para bandas acústicas y cerca de los ceros de ϵ^M , pero es cuestionable cerca de los ceros de μ^M .

7. Conclusiones

Obtuvimos expresiones analíticas para la respuesta dieléctrica macroscópica de un cristal fotónico unidimensional, las cuales conducen a una respuesta dispersiva y no local, con una dependencia en el número de onda independiente de su dependencia en la frecuencia. Nuestros resultados son consistentes con un cálculo numérico aplicable a sistemas con periodicidad a lo largo de un número arbitrario de dimensiones. Además, analizamos sus casos límites como es el caso cuasiestático. Mostramos cómo la respuesta macroscópica permite calcular los modos propios del sistema a partir de la relación de dispersión macroscópica no local. Verificamos que las bandas fotónicas correspondientes coinciden exactamente con las calculadas con métodos alternativos como el método de la matriz de transferencia. Una aproximación local conduce a una respuesta magnética aún cuando las componentes del sistema son no magnéticas. Mostramos que la aproximación local conduce a las bandas fotónicas correctas para números de onda pequeños cuando la frecuencia o la permitividad se pequeña, aunque hay algunas discrepancias fuertes cuando la permeabilidad es pequeña. Los resultados anteriores arrojan luz sobre las bandas fotónicas y su interpretación en sistemas de mayor dimensionalidad.

Referencias

- H. A. Bethe. Theory of diffraction by small holes. *Phys. Rev.*, 66(7-8):163–182, Oct 1944.
- [2] Ebbesen T. W., Lezec H. J., Thio T. Ghaemi H. F., and Wolff P. A. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. *Nature*, 391(667), 1998.
- [3] W. Luis Mochan. Plasmons. Encyclopaedia of Condensed Matter Physics, 310, 2005.
- [4] Martín-Moreno, L., García-Vidal, F. J., Lezec, H. J., Pellerin, K. M., T. Thio, Pendry, J. B., and T. W. Ebbesen. Theory of extraordinary optical transmission through subwavelength hole arrays. *Phys. Rev. Lett.*, 86(6):1114–1117, Feb 2001.
- Haitao Liu and Philippe Lalanne. Microscopic theory of the extraordinary optical transmission. *Nature*, 452(7188):728-731, 2008.
- [6] Reuven Gordon, David Sinton, Karen L Kavanagh, and Alexandre G Brolo. A new generation of sensors based on extraordinary optical transmission. Accounts of chemical research, 41(8):1049–1057, 2008.

- [7] Tae Jin Kim, Tineke Thio, Thomas W Ebbesen, DE Grupp, and Henri J Lezec. Control of optical transmission through metals perforated with subwavelength hole arrays. *Optics Letters*, 24(4):256–258, 1999.
- [8] J. B. Pendry, L. Martin-Moreno, and F. J. Garcia-Vidal. Mimicking Surface Plasmons with Structured Surfaces. *Science*, 305(5685):847– 848, 2004.
- F. J. García de Abajo and J. J. Sáenz. Electromagnetic surface modes in structured perfect-conductor surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 95:233901, Nov 2005.
- [10] M. Beruete, M. Navarro-Cía, F. Falcone, I. Campillo, and M. Sorolla. Single negative birefringence in stacked spoof plasmon metasurfaces by prism experiment. *Opt. Lett.*, 35(5):643–645, 2010.
- [11] Julia Braun, Bruno Gompf, Georg Kobiela, and Martin Dressel. How holes can obscure the view: Suppressed transmission through an ultrathin metal film by a subwavelength hole array. *Phys. Rev. Lett.*, 103(20):203901, Nov 2009.
- [12] Mingkai Liu, Yanjun Song, Yanbing Zhang, Xuehua Wang, and Chongjun Jin. Mode evolution and transmission suppression in a perforated ultrathin metallic film with a triangular array of holes. *Plasmonics*, 7(3):397–410, 2012.
- [13] A Yu Nikitin, F Guinea, Francisco J Garcia-Vidal, and Luis Martin-Moreno. Surface plasmon enhanced absorption and suppressed transmission in periodic arrays of graphene ribbons. *Physical Review B*, 85(8):081405, 2012.
- [14] Edward M Purcell and Carlton R Pennypacker. Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains. *The Astrophysical Journal*, 186:705–714, 1973.
- [15] Rongzhou Wang, Xue-Hua Wang, Ben-Yuan Gu, and Guo-Zhen Yang. Effects of shapes and orientations of scatterers and lattice symmetries on the photonic band gap in two-dimensional photonic crystals. *Journal of Applied Physics*, 90(9):4307–4313, 2001.
- [16] John David Jackson. Classical Electrodynamics. Wiley, 1998.
- [17] L.D. Landau and E.M. Lifshits. *Electrodynamics of continuous media*. Course of theoretical physics. Pergamon Press Ltd., 1984.
- [18] B.E.A. Saleh and M.C. Teich. Fundamentals of Photonics. Wiley Series in Pure and Applied Optics. John Wiley & Sons, 2007.
- [19] J.B. Pendry, A. J. Holden, D. J. Robbins, and W. J. Stewart. Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena. *Microwa*ve Theory and Techniques, *IEEE Transactions on*, 47(11):2075–2084, 1999.
- [20] M. Notomi. Theory of light propagation in strongly modulated photonic crystals: Refractionlike behavior in the vicinity of the photonic band gap. *Phys. Rev. B*, 62:10696–10705, Oct 2000.
- [21] Rubén G. Barrera, Alejandro Reyes-Coronado, and Augusto García-Valenzuela. Nonlocal nature of the electrodynamic response of colloidal systems. *Phys. Rev. B*, 75:184202, May 2007.

- [22] Pochi Yeh, Amnon Yariv, and Chi-Shain Hong. Electromagnetic propagation in periodic stratified media. i. general theory. J. Opt. Soc. Am., 67(4):423–438, Apr 1977.
- [23] W. Luis Mochán and Rubén G. Barrera. Electromagnetic response of systems with spatial fluctuations. I. General formalism. *Phys. Rev.* B, 32(8):4984–4988, Oct 1985.
- [24] W. Luis Mochán and Rubén G. Barrera. Electromagnetic response of systems with spatial fluctuations. II. Applications. *Phys. Rev. B*, 32(8):4989–5001, Oct 1985.
- [25] Hideo Kosaka, Takayuki Kawashima, Akihisa Tomita, Masaya Notomi, Toshiaki Tamamura, Takashi Sato, and Shojiro Kawakami. Superprism phenomena in photonic crystals. *Phys. Rev. B*, 58:R10096– R10099, Oct 1998.
- [26] D. Stroud and F. P. Pan. Self-consistent approach to electromagnetic wave propagation in composite media: Application to model granular metals. *Phys. Rev. B*, 17:1602–1610, Feb 1978.
- [27] G.P. Ortiz and W.L. Mochán. Scaling of light scattered from fractal aggregates at resonance. *Phys. Rev. B.*, 67(184204), 2003.
- [28] G.P. Ortiz and W.L. Mochán. Scaling condition for multiple scattering in fractal aggregates. *Physica B*, 338:54, 2003.
- [29] G.P. Ortiz, C.López-Bastidas, J.A.Maytorena, and W.L.Mochán. Bulk response of composite from finite samples. *Physica B*, 338:103, 2003.
- [30] M. Hilke. Seeing anderson localization. Phys. Rev. A, 80:063820, Dec 2009.
- [31] Sahar A. El-Naggar. Dependency of the photonic band gaps in twodimensional metallic photonic crystals on the shapes and orientations of rods. *Optical Engineering*, 51(6):068001–1–068001–8, 2012.
- [32] Linfang Shen, Sailing He, and Sanshui Xiao. Large absolute band gaps in two-dimensional photonic crystals formed by large dielectric pixels. *Physical Review B*, 66(16):165315, 2002.
- [33] Cheryl M Anderson and Konstantinos P Giapis. Larger twodimensional photonic band gaps. *Physical review letters*, 77(14):2949– 2952, 1996.
- [34] Xiangdong Zhang and Zhao-Qing Zhang. Creating a gap without symmetry breaking in two-dimensional photonic crystals. *Physical Review B*, 61(15):9847, 2000.
- [35] D Cassagne, C Jouanin, and D Bertho. Hexagonal photonic-band-gap structures. *Physical Review B*, 53(11):7134, 1996.
- [36] Xue-Hua Wang, Ben-Yuan Gu, Zhi-Yuan Li, and Guo-Zhen Yang. Large absolute photonic band gaps created by rotating noncircular rods in two-dimensional lattices. *Physical Review B*, 60(16):11417, 1999.
- [37] Zhi-Yuan Li, Ben-Yuan Gu, and Guo-Zhen Yang. Large absolute band gap in 2d anisotropic photonic crystals. *Physical review letters*, 81(12):2574–2577, 1998.

- [38] M. Ouaddari, S. Delprat, F. Vidal, M. Chaker, and Ke Wu. Microwave characterization of ferroelectric thin-film materials. *Microwa*ve Theory and Techniques, IEEE Transactions on, 53(4):1390–1397, 2005.
- [39] K. Vynck, D. Felbacq, E. Centeno, A. I. Căbuz, D. Cassagne, and B. Guizal. All-dielectric rod-type metamaterials at optical frequencies. *Phys. Rev. Lett.*, 102:133901, Mar 2009.
- [40] Tal Schwartz, Guy Bartal, Shmuel Fishman, and Mordechai Segev. Transport and anderson localization in disordered two-dimensional photonic lattices. *Nature*, 446(7131):52–55, 2007.
- [41] Henri J. Lezec, Jennifer A. Dionne, and Harry A. Atwater. Negative refraction at visible frequencies. *Science*, 316(5823):430–432, 2007.
- [42] Jiabi Chen, Yan Wang, Baohua Jia, Tao Geng, Xiangping Li, Lie Feng, Wei Qian, Bingming Liang, Xuanxiong Zhang, Min Gu, and Songlin and Zhuang. Observation of the inverse doppler effect in negative-index materials at optical frequencies. *P Nat Photon*, 5(4):239–245, 2011.
- [43] Baile Zhang, Yuan Luo, Xiaogang Liu, and George Barbastathis. Macroscopic invisibility cloak for visible light. *Phys. Rev. Lett.*, 106:033901, Jan 2011.
- [44] Yaroslav A. Urzhumov and Gennady Shvets. Optical magnetism and negative refraction in plasmonic metamaterials. *Solid State Communications*, 146(5–6):208 – 220, 2008. Special section on Negative Refraction and Metamaterials for Optical Science and Engineering.
- [45] Costas M Soukoulis and Martin Wegener. Past achievements and future challenges in the development of three-dimensional photonic metamaterials. *Nature Photonics*, 5(9):523–530, 2011.
- [46] Richard A Shelby, David R Smith, and Seldon Schultz. Experimental verification of a negative index of refraction. *science*, 292(5514):77– 79, 2001.
- [47] Victor Georgievich Veselago. The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of ϵ and μ . *Physics-Uspekhi*, 10(4):509–514, 1968.
- [48] Kane Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media. Antennas and Propagation, IEEE Transactions on, 14(3):302 –307, may 1966.
- [49] Wenbo Sun, Huiying Pan, and Gorden Videen. General finitedifference time-domain solution of an arbitrary electromagnetic source interaction with an arbitrary dielectric surface. Applied optics, 48(31):6015–6025, 2009.
- [50] Howard DeVoe. Optical properties of molecular aggregates. i. classical model of electronic absorption and refraction. *The Journal of Chemical Physics*, 41(2):393–400, 1964.
- [51] G. W. Milton, R. C. McPhedran, and D. R. McKenzie. Transport properties of arrays of intersecting cylinders. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 25(1):23–30, 1981.

- [52] David J. Bergman and Keh-Jim Dunn. Bulk effective dielectric constant of a composite with a periodic microgeometry. *Phys. Rev. B*, 45(23):13262–13271, Jun 1992.
- [53] Ruibao Tao, Zhe Chen, and Ping Sheng. First-principles fourier approach for the calculation of the effective dielectric constant of periodic composites. *Phys. Rev. B*, 41(4):2417–2420, Feb 1990.
- [54] S. Datta, C. T. Chan, K. M. Ho, and C. M. Soukoulis. Effective dielectric constant of periodic composite structures. *Phys. Rev. B*, 48(20):14936–14943, Nov 1993.
- [55] A. Alexopoulos. Effective-medium theory of surfaces and metasurfaces containing two-dimensional binary inclusions. *Phys. Rev. E*, 81(4):046607, Apr 2010.
- [56] William T. Doyle. Optical properties of a suspension of metal spheres. *Phys. Rev. B*, 39(14):9852–9858, May 1989.
- [57] Alon Ludwig and Kevin J. Webb. Accuracy of effective medium parameter extraction procedures for optical metamaterials. *Phys. Rev. B*, 81(11):113103, Mar 2010.
- [58] João T. Costa, Mário G. Silveirinha, and Stanislav I. Maslovski. Finite-difference frequency-domain method for the extraction of effective parameters of metamaterials. *Phys. Rev. B*, 80:235124, Dec 2009.
- [59] Guillermo P. Ortiz, Brenda E. Martínez-Zérega, Bernardo S. Mendoza, and W. Luis Mochán. Effective optical response of metamaterials. *Phys. Rev. B*, 79(24):245132, Jun 2009.
- [60] Mário G. Silveirinha. Nonlocal homogenization model for a periodic array of ϵ -negative rods. *Phys. Rev. E*, 73:046612, Apr 2006.
- [61] W. Luis Mochan, Guillermo P. Ortiz, and Bernardo S. Mendoza. Efficient homogenization procedure for the calculation of optical properties of 3d nanostructured composites. *Opt. Express*, 18(21):22119– 22127, Oct 2010.
- [62] V. Myroshnychenko and C. Brosseau. Analysis of the effective permittivity in percolative composites using finite element calculations. *Physica B: Condensed Matter*, 405(14):3046 – 3049, 2010. Proceedings of the Eighth International Conference on Electrical Transport and Optical Properties of Inhomogeneous Media; ETOPIM-8.
- [63] S. Guenneau, F. Zolla, and A. Nicolet. Homogenization of 3d finite photonic crystals with heterogeneous permittivity and permeability. *Waves in Random and Complex Media*, 17(4):653–697, 2007.
- [64] A. I. Căbuz, A. Nicolet, F. Zolla, D. Felbacq, and G. Bouchitté. Homogenization of nonlocal wire metamaterial via a renormalization approach. J. Opt. Soc. Am. B, 28(5):1275–1282, May 2011.
- [65] Shreyas B. Raghunathan and Neil V. Budko. Effective permittivity of finite inhomogeneous objects. *Phys. Rev. B*, 81:054206, Feb 2010.
- [66] P. Halevi, A. A. Krokhin, and J. Arriaga. Photonic crystal optics and homogenization of 2d periodic composites. *Phys. Rev. Lett.*, 82:719– 722, Jan 1999.

- [67] P. Halevi and F. Pérez-Rodríguez. From photonic crystals (via homogenization) to metamaterials. In Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series, volume 6320 of Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series, August 2006.
- [68] C R Simovski. On electromagnetic characterization and homogenization of nanostructured metamaterials. *Journal of Optics*, 13(1):013001, 2011.
- [69] Christoph Menzel, Thomas Paul, Carsten Rockstuhl, Thomas Pertsch, Sergei Tretyakov, and Falk Lederer. Validity of effective material parameters for optical fishnet metamaterials. *Phys. Rev. B*, 81(3):035320, Jan 2010.
- [70] J. S. Pérez-Huerta, B. Mendoza-Santoyo, G. Ortiz, and W. Luis Mochán. Propiedades macroscópicas y propagación fotónica en metamateriales. In José Récamier, editor, *Memorias de la XIX Escuela de* Verano en Física, (Cuernavaca, Morelos, Julio 25-Agosto 5, 2011), pages 170–195. UNAM, 2012.
- [71] J S Pérez-Huerta, Guillermo P Ortiz, Bernardo S Mendoza, and W Luis Mochán. Macroscopic optical response and photonic bands. *New Journal of Physics*, 15(4):043037, 2013.
- [72] Pochi Yeh. Optics of anisotropic layered media: a new 4×4 matrix algebra. *Surface Science*, 96(1):41–53, 1980.
- [73] W. M. Robertson and G. Arjavalingam. Measeuremen of photonic band structure in a two-dimensional periodic dielectric array. *Phys. Rev. Lett.*, 68(13):2023, 1992.
- [74] J A Reyes-Avendaño, U Algredo-Badillo, P Halevi, and F Pérez-Rodríguez. From photonic crystals to metamaterials: the bianisotropic response. New Journal of Physics, 13(7):073041, 2011.
- [75] Mário G. Silveirinha. Metamaterial homogenization approach with application to the characterization of microstructured composites with negative parameters. *Phys. Rev. B*, 75:115104, Mar 2007.
- [76] V. M. Agranovich, Y. R. Shen, R. H. Baughman, and A. A. Zakhidov. Linear and nonlinear wave propagation in negative refraction metamaterials. *Phys. Rev. B*, 69:165112, Apr 2004.
- [77] V.M. Agranovič and V.L. Ginzburg. Spatial Dispersion in Crystal Optics and the Theory of Excitons. Number v. 18 in Interscience monographs and texts in physics and astronomy, v. 18. Interscience Publishers, 1966.

Estados coherentes dependientes del tiempo con fotones añadidos

José Récamier Instituto de Ciencias Físicas Universidad Nacional Autónoma de México

January 9, 2014

Los estados coherentes para el campo electromagnético fueron introducidos por Glauber en 1963 [1] y han jugado un importante papel en el campo de la óptica cuántica. El desarrollo de los láseres ha hecho posible la generación de estados de luz con propiedades muy cercanas a las de los estados coherentes. Su comportamiento corresponde al de una onda clásica. Glauber mostró que los estados coherentes pueden obtenerse a partir de cualquiera de las siguientes definiciones: (i) como estados propios del operador de aniquilación: $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, (ii) mediante el operador de desplazamiento $D(\alpha) = \exp(\alpha \hat{a}^{\dagger} - \alpha^* \hat{a})$ aplicado al estado de vacío: $D(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle$ o bien (iii) como estados que saturan la relación de incertidumbre: $\Delta \hat{q} \Delta \hat{p} = \hbar/2$ siendo $\Delta O = \sqrt{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2}$ y \hat{q} , \hat{p} los operadores de posición y momento respectivamente.

Consideremos el Hamiltoniano de un oscilador armónico unidimensional

$$H_{oa} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{q}^2.$$
 (1)

Escrito en términos de operadores de creación \hat{a}^{\dagger} y aniquilación \hat{a} definidos mediante las expresiones:

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a}^{\dagger} - \hat{a})$$
 (2)

obtenemos

$$H_{oa} = \hbar\omega(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2}) \equiv \hbar\omega(\hat{n} + \frac{1}{2})$$
(3)

sus estados coherentes $|\alpha\rangle$ pueden obtenerse a partir de cualquiera de las tres definiciones dadas arriba.

Es fácil ver que los estados coherentes debidamente normalizados están dados en la base de estados de número (estados propios del operador $\hat{n} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}$) como:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \tag{4}$$

para ello basta usar las relaciones:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$$

y sustituir en la definición

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle.$$

De la expresión dada en la ecuación 4 se puede mostrar que los estados $|\alpha\rangle$ son estados de mínima dispersión. Además, utilizando el conmutador

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1$$

es posible escribir el operador de desplazamiento como:

$$D(\alpha) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha \hat{a}^{\dagger}} e^{\alpha^* \hat{a}}$$

que aplicado al estado de vacío nos da:

$$D(\alpha)|0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha \hat{a}^{\dagger}}|0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \hat{a}^{\dagger n}|0\rangle$$

y usando que:

$$\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle = \sqrt{n!}|n\rangle$$

obtenemos:

$$D(\alpha)|0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$
(5)

que es la misma expresión que la dada en la ecuación 4. La probabilidad de encontrar ocupado el estado n para un estado coherente $|\alpha\rangle$ está dada por:

$$P_n(\alpha) = |\langle n | \alpha \rangle|^2 = |e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}$$
(6)

que es una distribución de Poisson.

Para un Hamiltoniano lineal $H = \hbar \Omega \hat{n}$ que no depende explícitamente del tiempo el operador de evolución temporal es:

$$U(t) = e^{-i\Omega t\hat{n}} \tag{7}$$

así que un estado coherente al tiempo $t_0 = 0$ evoluciona en un estado

$$|\alpha(t)\rangle = U(t)|\alpha(t_0)\rangle = e^{-i\Omega t\hat{n}}e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha e^{-i\Omega t})^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle,$$
(8)

que es un estado coherente con $\alpha(t) = \alpha e^{-i\Omega t}$.

Los estados coherentes con fotones añadidos (PACS por sus siglas en inglés) fueron introducidos por Agarwal y Tara [2] con la idea de tener estados que en un límite se comportan como estados clásidos (cuando $|\alpha|$ es grande) y en otro se comportan como estados puramente cuánticos (estados de número cuando $|\alpha|$ es pequeño). Se definen por la acción *m* veces del operador de creación sobre el estado coherente:

$$|\alpha, m\rangle = N_{\alpha, m} \hat{a}^{\dagger m} |\alpha\rangle \tag{9}$$

siendo $N_{\alpha,m} = 1/\sqrt{L_m(-|\alpha|^2)m!}$ una constante de normalización cuyo valor depende del tamaño del estado $|\alpha|$ y del número de fotones añadidos m. Aquí $L_m(x)$ es el polinomio de Laguerre de orden m.

Aplicando la definición dada en la ecuación 4 obtenemos, en la base de estados de número

$$|\alpha,m\rangle = \frac{e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}}{\sqrt{L_m(-|\alpha|^2)m!}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n \sqrt{(n+m)!}}{n!} |n+m\rangle.$$
 (10)

Nótese que la probabilidad de encontrar ocupado algún estado con n < m es cero, en contraste con el caso de los estados coherentes en donde la probabilidad de encontrar ocupado cualquier estado es diferente de cero.

En cuanto a su evolución temporal, un estado coherente con fotones añadidos al tiempo t está dado por:

$$|\alpha, m; t\rangle = U(t)|\alpha, m\rangle = e^{-i\Omega t\hat{n}}|\alpha, m\rangle$$
(11)

obteniendo el resultado:

$$|\alpha,m;t\rangle = \frac{e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}e^{-im\Omega t}}{\sqrt{L_m(-|\alpha|^2)m!}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\Omega t})^n}{n!} \sqrt{(n+m)!} |n+m\rangle.$$
(12)

Estos estados exhiben características no clásicas como compresión y estadística sub Poissoniana.

Primeramente veamos si son o no estados de mínima dispersión. Para ello requerimos los promedios de los operadores de posición y momento y sus cuadrados los cuales están dados por:

$$\langle \alpha, m; t | q | \alpha, m; t \rangle = \frac{\sqrt{2}e^{-|\alpha|^2}}{L_m(-|\alpha|^2)m!} \left[Re(\alpha e^{-i\Omega t}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}(n+m+1)!}{n!(n+1)!} \right]$$
(13)

$$\langle \alpha, m; t | p | \alpha, m; t \rangle = -\frac{\sqrt{2}e^{-|\alpha|^2}}{L_m(-|\alpha|^2)m!} \left[Im(\alpha e^{-i\Omega t}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}(n+m+1)!}{n!(n+1)!} \right]$$
(14)
 y usando que $q^2 = \frac{1}{2}(\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + 2\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1)$ y $p^2 = -\frac{1}{2}(\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} - 2\hat{a}^{\dagger}\hat{a} - 1)$

$$\langle \alpha, m; t | q^2 | \alpha, m; t \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right) \frac{e^{-|\alpha|^2}}{L_m(-|\alpha|^2)m!} [(\alpha(t)^2 + \alpha^*(t)^2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}(n+m+2)!}{n!(n+2)!} \\ + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}(n+m)!((n+m) + \frac{1}{2})}{(n!)^2}](15)$$

$$\langle \alpha, m; t | p^2 | \alpha, m; t \rangle = -\left(\frac{\hbar m \omega}{2}\right) \frac{e^{-|\alpha|^2}}{L_m(-|\alpha|^2)m!} [(\alpha(t)^2 + \alpha^*(t)^2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}(n+m+2)!}{n!(n+2)!} \\ -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}((n+m) + \frac{1}{2})(n+m)!}{(n!)^2}](16)$$

de donde podemos obtener las dispersiones en cada una de las variables así como su producto

$$\Delta(q(t)) = \sqrt{\langle \alpha, m; t | q^2 | \alpha, m; t \rangle - (\langle \alpha, m; t | q | \alpha, m; t \rangle)^2}$$
(17)

у

$$\Delta(p(t)) = \sqrt{\langle \alpha, m; t | p^2 | \alpha, m; t \rangle - (\langle \alpha, m; t | p | \alpha, m; t \rangle)^2}$$
(18)

La figura 1 muestra el producto de las dispersiones $\Delta q(t_0)\Delta p(t_0)$ en función de la parte real del parámetro $\alpha = x + iy$ para un estado coherente con cero, cinco, diez y quince fotones añadidos. Cuando x = 0 la dispersión toma valores cercanos a 1/2, 11/2, 21/2 y 31/2 que corresponden a los valores que tendría la dispersión para los estados de número $|0\rangle$, $|5\rangle$, $|10\rangle$ y $|15\rangle$. Para valores mayores de x el producto de las dispersiones se aproxima a 1/2 que es el valor que corresponde a un estado coherente. Vemos pues que, para valores de $|\alpha| \simeq 0$ el estado $|\alpha, m\rangle$ se comporta como el estado de número $|m\rangle$ mientras que para valores grandes de $|\alpha|$ el estado tiende a comportarse como un estado coherente. De la figura es claro que los PACS no son estados de mínima dispersión.

La figura 2 muestra la dispersión en la coordenada para los mismos valores de m que los presentados en la figura anterior. Es claro que para los estados con fotones añadidos en una amplia región de valores de $|\alpha|$ la dispersión Δq presenta compresión, esto es, su valor es menor que el que se tiene para un estado coherente. Dado que el producto de las dispersiones es siempre mayor o igual que el de un estado coherente, la dispersión en el momento crece a expensas de la disminución de la dispersión en la coordenada.



Figure 1: Producto de las dispersiones $\Delta(q(t_0))\Delta(p(t_0))$ para $\alpha = (x, 0)$ con m = 0, 5, 10, 15 fotones añadidos, $x \in [0, 4]$, y $t_0 = 0$.

La figura 3 muestra la dispersión en la coordenada $\Delta q(t)$ para valores de m = 0, 5, 10 y 15 en función del tiempo para un valor fijo de $\alpha = 1$. El caso con m = 0 (sin fotones añadidos) tiene uns dispersión constante igual a $1/\sqrt{2}$ correspondiente a un estado con mínima dispersión. En una región cercana a $t_0 = 0$ se puede observar el fenómeno de compresión en todos los otros casos con $m \neq 0$. Este comportamiento se repite de forma periódica presentándose de nuevo alrededor de $\pi, 2\pi$, etc. Se puede notar también que el valor que



Figure 2: Dispersión $\Delta(q(t_0))$ para $\alpha = (x, 0)$ y $m = 0, 5, 10, 15, x \in [0, 4]$, and $t_0 = 0$.

en aquellas regiones del tiempo en donde no hay compresión la dispersión se incrementa con el valor de m así como el grado de compresión, a mayor m mayor compresión. El parámetro de Mandel [3] nos permite distinguir



Figure 3: Evolución temporal de la dispersión $\Delta(q(t))$ para $\alpha = (1,0)$ and $m = 0, 5, 10 \text{ y } 15, t \in [0, 2\pi]$.

entre estados cuánticos con análogo clásico y aquellos estados cuánticos que no cuentan con análogo clásico y son estrictamente cuánticos. El parámetro de Mandel se define como:

$$Q = \frac{\langle (\hat{a}^{\dagger}\hat{a})^2 \rangle - \langle \hat{a}^{\dagger}\hat{a} \rangle^2}{\langle \hat{a}^{\dagger}\hat{a} \rangle}.$$
 (19)

Los estados cuánticos que tienen estadística Poissoniana tienen Q = 1, los que tienen estadística super-poissoniana tienen Q > 1 y los que tienen estadística sub-poissoniana tienen Q < 1. Aquellos estados con estadística sub-poissoniana no tienen análogo clásico. Como vimos anteriormente, los estados coherentes $|\alpha\rangle$ tienen estadística poissoniana por lo que su parámetro de Mandel es Q = 1.

Para el caso de estados coherentes con fotones añadidos tenemos:

$$\langle \alpha, m | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} | \alpha, m \rangle = \frac{\langle \alpha | \hat{a}^{m} (\hat{a}^{\dagger} \hat{a}) \hat{a}^{\dagger m} | \alpha \rangle}{L_{m} (-|\alpha|^{2}) m!} = \frac{\langle \alpha | \hat{a}^{m+1} \hat{a}^{\dagger m+1} | \alpha \rangle - \langle \alpha | \hat{a}^{m} \hat{a}^{\dagger m} | \alpha \rangle}{L_{m} (-|\alpha|^{2}) m!}$$
$$= \frac{L_{m+1} (-|\alpha|^{2}) (m+1)! - L_{m} (-|\alpha|^{2}) m!}{L_{m} (-|\alpha|^{2}) m!} (20)$$

y procediendo de manera similar

$$\langle \alpha, m | \hat{a}^{\dagger 2} \hat{a}^{2} | \alpha, m \rangle = \frac{L_{m+2}(-|\alpha|^{2})(m+2)! - 3L_{m+1}(-|\alpha|^{2})(m+1)! + L_{m}(-|\alpha|^{2})m!}{L_{m}(-|\alpha|^{2})m!}$$
(21)

utilizando las expresiones dadas arriba podemos calcular el parámetro de Mandel.

La figura 4 muestra el parámetro de Mandel en función de la parte real de α para estados con m = 0, 5, 10 y 15 fotones añadidos. Puede notarse que los estados coherentes con fotones añadidos presentan una estadística sub-poissoniana por lo que no tienen análogo clásico.

Los estados coherentes con fotones añadidos han sido utilizados para comprobar experimentalmente las relaciones de conmutación cuánticas $[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1$ [4].



Figure 4: Parámetro de Mandel en función de la parte real de α para valores de m = 0, 5, 10 y 15.

References

- [1] R J Glauber, Phys. Rev. 130, 2529 (1963); 131, 2766 (1963).
- [2] GS Agarwal and K Tara, Physical Review A **43**(1) 492-498 (1991)
- [3] R. Short and L. Mandel, Phys. Rev. Lett. 51 (5) 384-387 (1983).
- [4] Valentina Parigi, Alessandro Zavatta, Myungshik Kim, Marco Bellini, Science 317, 1890 (2007).

Optical properties of PbS quantum dots

B. Ullrich

Laboratorio de Óptica, Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, Morelos, México C.P. 62210 Email: bruno@fis.unam.mx

I. Introduction

Motivated by ample applications in nano-structured devices in conjunction with optical fibers, the absorption features and dielectric function of PbS quantum dots (QDs) have been comprehensively studied in theory and experiment.¹⁻⁴ Similarly, the emission of PbS ODs has sparked an outburst of research activities as well.⁵⁻¹⁰ However, less attention was focused on the divergences between the absorption and emission properties.³ In particular, the Stokes shift, i.e., the red shift of the photoluminescence (PL) peak with respect to the peak of the optical absorbance (OA),¹⁰ is typically only reported at 300 K. Recently, the temperature dependence and the variation with the impinging laser intensity of the Stokes shift for 4.7 nm PbS QDs were reported in detail.¹¹ On the other hand, for smaller ODs (3 nm and below), thorough comparative investigations of the temperature dependent PL and OA characteristics are still missing. The knowledge of the temperature dependent behaviors is of importance for the fundamental understanding of the optical properties and to further develop the full application potential of PbS QDs in optoelectronic devices. Here, the comparison of the PL and OA features of 2.7 nm PbS QDs of the identical sample is presented through detailed studies of the temperature dependence of the lowest interband transition. The results shine light on the extrinsic nature of the PL and further demonstrate that the thermal dependence of the Stokes shift is mainly caused by the energy variation of PL peak position.

II. Sample preparation and measurements

The oleic acid capped PbS QDs investigated were deposited on glass with the supercritical fluid CO₂ method described elsewhere.¹² Scanning electron microscopy (SEM) revealed that the glass surface was homogeneously covered with QDs of 2.7 (\pm 0.4) nm diameter. For the optical experiments, BOMEM Fourier transform spectrometers were employed.⁹ The PL

experiments were carried out by exciting the sample with the continuous wave (cw) emission at 532 nm of a solid state laser. To minimize the alteration of the lowest radiative recombination transition due to laser (over) excitation,⁸ we kept the impinging intensity around 10 W/cm². The OA was determined via the transmittance of the sample employing the internal quartz lamp source of the BOMEM. The change in transmission due to the QDs was only 2 to 3 percent, causing a rather large scattering of the data. The weakness of the signal and the accompanied difficulties to collect low-noise data explain the absence of OA spectra for PbS QDs below 3 nm in the literature.

III. Photoluminescence and optical absorbance

Figure 1 shows the PL spectra for selected temperatures. The symbols, which appear to be lines due to the high data density, represent the measurements, and the dotted lines are Gaussian fits with $\chi^2 \ge 0.996$. Figure 2 displays OA spectra for several temperatures. Again, the symbols mark the experimental results and the dotted lines were achieved with the Gaussian function incorporating a linear offset, which was caused by the light scatter at the ligands. The agreement between the fits and the experiments is once more satisfactory ($\chi^2 \ge 0.972$).

The thermally induced energy shifts of the PL and OA peaks are shown in Fig. 3, whereas the OA peak shift indicates the band gap change of the QDs.⁸ The symbols represent the data collected with the Gaussian fits of the spectra (as those shown in Figs. 1 and 2) and the dotted lines show the fits of the respective peak trends using Fan's expression,¹³

$$E_{\text{Peak}}(T) = E_{\text{Peak},0} + A / \{ \exp(\langle E_p \rangle / kT) - 1 \},$$
(1)

where, $E_{\text{Peak},0}$ is the peak energy approaching T=0 K, A is the Fan parameter, which depends on the microscopic material properties, and $\langle E_p \rangle$ is the average phonon energy responsible for the band gap variation, and $k=8.62\times10^{-5}$ eV/K is the Boltzmann constant. The fit parameters are summarized in table I. The overall temperature coefficient of 112 µeV/K and 34 µeV/K of the PL and OA peaks in Fig. 3, is one third in comparison to the equivalent variations achieved with 4.7 nm QDs.⁸⁻¹⁰ The clear reduction of the temperature variation of the lowest energy transition is expected with shrinking QD diameter, and the found 34 µeV/K coincides fairly well with the estimated OA temperature coefficient of 20-30 µeV/K based on electron-phonon interactions for 3 nm QDs.¹ The most remarkable result here is the *qualitative* difference of the thermally induced energy shifts between PL and OA peaks. The different appearance plainly demonstrates the decoupling of the absorptive and radiative transitions channels in the PbS QDs. Based on the results of Fernée et al.¹⁴ and our previous work,¹⁰ the radiative recombination could be linked to surface traps localized below the bulk PbS valence band edge. It is important to note that the formation of surface states is enhanced for strongly confined PbS QDs (with a diameter < 3 nm).¹⁴ Labeling the lowest OA transition between the confined states of the hole and the electron with h₁ and e₁, Fig. 4 shows the schematic energy band diagram of the absorption and emission transitions at 5 K and 300 K with respect to the PbS bulk band gap. The simple assumption that the e₁ and h₁ states move equally away from the PbS band gap was used due to the relatively equal effective mass of the electron and holes. However, this assumption may be the cause of the 23.4 meV discrepancy in the location of the trap state (as calculated at 10 K and 300 K), and additionally, the effective mass might depend on the temperature.¹⁵

IV. Conclusion

We presented a comprehensive study of the thermally induced PL and OA peak shifts of 2.7 nm QDs. Confirming the statement in Ref. 8 - that the absorption of the PbS QDs reflects the intrinsic properties of the confined electrons - the OA follows the theoretical expectations by hardly showing a temperature dependence of the quantum confined interband transition. The PL peak, however, qualitatively follows the temperature behavior of PbS bulk material (although quantitatively clearly reduced) because of the recombination into surface traps.

References:

- ¹ A. Olkhovets, R.-C. Hsu, A. Lipovskii, and F. W. Wise, Phys. Rev. Lett. 81, 3539 (1998).
- ² L. Cademartiri, E. Montanari, G. Calestani, A. Migliori, A. Guagliardi, and G. A. Ozin, J. Am. Chem. Soc. **128**, 10337 (2006).
- ³ C. Liu, Y. K. Kwon, and J. Heo, J. Non-Cryst. Solids 355, 1880 (2009).
- ⁴ I. Moreels, D. Kruschke, P. Glas, and J. W. Tomm, Optical Mat. Express 2, 498 (2012).
- ⁵ L. Turyanska, A. Patanè, M. Henini, B. Hennequin, and N. R. Thomas, Appl. Phys. Lett. 90, 101913 (2007).
- ⁶ B. Ullrich, X. Y. Xiao, and G. J. Brown, J. Appl. Phys. **108**, 013525, (2010).
- ⁷ M. S. Gaponenko, A. A. Lutich, N. A. Tolstik, A. A. Onushchenko, A. M. Malyarevich, E. P. Petrov, and K. V. Yumashev, Phys. Rev. B **82**, 125320 (2010).
- ⁸ B. Ullrich, J. S. Wang, and G. J. Brown, Appl. Phys. Lett. **99**, 081901, (2011).
- ⁹ B. Ullrich, J. S. Wang, X. Y. Xiao, and G. J. Brown, Proceedings SPIE Vol. **8271**, 82710A-1 (2012).
- ¹⁰ J. S. Wang, B. Ullrich, and G. J. Brown, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. **1409** © 2012 Materials Research Society, DOI: 10.1557/opl.2012.755 (6 pages).
- ¹¹ B. Ullrich and J. S. Wang, Appl. Phys. Lett. **102**, 071905 (2013).
- ¹² J. S. Wang, B. Ullrich, G. J. Brown, and C. M. Wai, Mat. Chem. Phys. 141, 195 (2013).
- ¹³ H. Y. Fan, Phys. Rev. **82**, 900 (1951).
- ¹⁴ M. J. Fernée, E. Thomsen, P. Jensen, and H. Rubinsztein-Dunlop, Nanotech. 17, 956 (2008).
- ¹⁵ T. J. Liptay and R. J. Ram, Appl. Phys. Lett. **89**, 223132 (2006).
Table I: Fit parameters used in Eq. (1) in order to fit the temperature dependence of the OA and PL peaks in Fig. 3.

Measurement	$E_{\text{Peak},0}$ (eV)	A (meV)	$\langle E_{\rm p} \rangle$ (meV)	Goodness of fit
OA	1.2667±0.0022	0.9±0.5	2.0±0.9	0.834
PL	1.0902±0.0003	33.0±4.3	17.2±1.6	0.998



Figure 1: PL spectra (symbols, which appear to be lines due to the high data density) and fits (broken lines) for selected temperatures.



Figure 2: OA spectra (symbols, which appear to be lines due to the high data density) and fits (broken lines) for selected temperatures.



Figure 3: PL and OA peak positions vs. temperature.



Figure 4: Schematic band diagram (not to scale) illustrating the decoupled OA and PL transitions. The lowest transition of the QD is labeled with h_1 and e_1 , indicating the optical excitation of an electron-hole pair. The temperature dependence of the PL is attributed to the radiative recombination into a surface trap state located ~0.3 eV below the bulk PbS valence band edge.