

# ESCUELA DE VERANO EN FÍSICA EN LA UNAM

JUNIO 12 -23, 2017

Instituto de Física, UNAM, 12-16 junio  
Instituto de Ciencias Físicas, UNAM 19-23 junio

*Editores*

JOSÉ RECAMIER  
ROCÍO JÁUREGUI



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
2017

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

Primera edición electrónica: Marzo de 2019

D.R. © 2019 UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Ciudad Universitaria, 04510, Ciudad de México  
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.

ISSN: 2594-2697

Hecho en México

# CONTENIDO

Introducción	4
Agradecimientos	5
Contribuciones	6
Profesores participantes	7
Alumnos participantes	10

## **Introducción**

La XXV Escuela de Verano en Física fue organizada con el apoyo del 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 12 al 16 de junio y en las instalaciones del Instituto de Ciencias Físicas en Cuernavaca, Morelos, del 19 al 23 de junio.

En esta Escuela se impartieron 15 cursos cortos de cinco horas de duración cada uno y 30 conferencias. Los cursos y conferencias cubrieron un amplio espectro con temas como óptica cuántica, sistemas complejos, óptica de meta-materiales, biofísica molecular, plasmas, redes complejas, física médica, estructuras fotónicas, química cuántica y física atómica, entre otros.

José Récamier, ICF UNAM  
Abril, 2018.

## **Agradecimientos**

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 y del Instituto de Ciencias Físicas.

## Contribuciones

- Marcelino Arciniega Castro, IFC UNAM, 11  
*Modelos de estados de Markov en el estudio de cambios conformacionales en proteínas.*
- Horacio Martínez Valencia, ICF UNAM, 15  
*Aplicaciones de plasmas fríos*
- Juan Carlos Degollado Daza, ICF UNAM, 17  
*Fundamentos de ondas gravitacionales.*
- Gabriel Germán Velarde, ICF UNAM, 27  
*Cosmología inflacionaria.*
- Adiv González Muñoz, IF UNAM, 40  
*La observación del universo extremo con HAWC.*
- Juan Carlos Hidalgo Cuéllar, ICF UNAM, 41  
*Invitación a las perturbaciones cosmológicas.*
- Guillermo Hinojosa Aguirre, ICF UNAM, 54  
*La física positiva de los iones negativos.*
- Lucila Juárez y W Luis Mochán, ICF UNAM, 60  
*Respuesta magnética de metamateriales.*
- Frédéric S Masset ICF UNAM, 88  
*Fricción dinámica: historia y resultados recientes.*
- J Récamier Angelini, C A González Gutiérrez,  
O de los Santos Sánchez, R Román Ancheyta, ICF UNAM, 95  
*Métodos algebraicos aplicados al sistema no estacionario ' atomo-cavidadóptica.*
- Humberto Saint Martin Posada , ICF UNAM, 106  
*El estudio de la coexistencia de fases por medio de simulaciones numericas (métodos directos).*
- J Alberto Vázquez y Luis E Padilla CINVESTAV, 157  
*Cosmología observacional y estadística.*

## Profesores participantes

- W. Luis Mochán, ICF UNAM, *Óptica de meta-materiales*
- Iván Ortega Blake, ICF UNAM, *Biofísica molecular*
- José Récamier Angelini, ICF UNAM, *Métodos algebraicos aplicados al sistema no estacionario átomo-cavidad óptica.*
- Maximino Aldana González, ICF UNAM, *Modelos de resistencia a antibióticos en bacterias.*
- Horacio Martínez Valencia, ICF UNAM, *Aplicaciones de los plasmas fríos*
- Roberto Sussman, ICN UNAM, *Relatividad general.*
- José Alberto Vázquez, CINVESTAV, *Estadística Bayesiana y cosmología observacional.*
- Antonio Juárez Reyes, ICF UNAM, *Aplicaciones de física molecular en medicina y monitoreo del agua*
- Gabriel Germán Velarde, ICF UNAM, *Cosmología inflacionaria*
- Adiv González, IF UNAM, *La observación del universo extremo con HAWC.*
- Marcelino Arciniega, IFC UNAM, *Física computacional en biología molecular.*
- Carlos González Gutiérrez, ICF UNAM, *Decoherencia y sistemas cuánticos abiertos.*
- François Leyvraz Waltz, ICF UNAM, *Modelos estocásticos y deterministas para transporte unidimensional.*
- Juan Carlos Hidalgo Cuéllar, ICF UNAM, *Formación de estructura y teoría de perturbaciones cosmológicas.*
- Frédéric Masset, ICF UNAM, *Fricción dinámica: historia y resultados recientes.*

- Alfredo Herrera Aguilar, IF BUAP, *Aspectos de mundos brana.*
- Sergio Cuevas García, IER UNAM, *Inestabilidades magnetohidrodinámicas en flujos de metal líquido*
- Remigio Cabrera Trujillo, ICF UNAM, *Métodos numéricos para resolver problemas de física atómica*
- Agustín González Flores, ICF UNAM, *Cristalización coloidal con fuerzas atractivas de corto alcance*
- Humberto Saint Martin Posada, ICF UNAM, *Estudios a escala molecular de la coexistencia de fases, por medio de simulaciones numéricas.*
- José Récamier Angelini, ICF UNAM, *Efecto Casimir dinámico*
- Juan Carlos Degollado Daza, ICF UNAM, *Fundamentos de ondas gravitacionales.*
- Agustín González Flores, ICF UNAM, *Cristalización coloidal con fuerzas atractivas de corto alcance.*
- Guillermo Hinojosa Aguirre, ICF UNAM, *La física positiva de los iones negativos.*
- Julia Tagüeña Parga, IER UNAM, *El sistema de Ciencia y Tecnología de México.*
- Carlos Villarreal Luján, IF UNAM, *El vacío cuántico.*
- Raúl Esquivel Sirvent, IF UNAM, *Plasmónica.*
- Axel de la Macorra, IF UNAM, *Cosmología y energía oscura.*
- Alejandro Vázquez Arzola, IF UNAM, *Técnicas de micromanipulación óptica.*
- Juan Escobar, IF UNAM, *Aplicación de modelos físicos a sistemas sociales.*
- Mariana Vargas, IF UNAM, *Cosmología observacional.*

- Gastón García Calderón, IF UNAM, *La física de las soluciones no hermitianas de la ecuación de Schrödinger.*
- Alberto Robledo, IF UNAM, *Manifestaciones del borde del caos en sistemas complejos.*
- Shahen Hacyan, IF UNAM, *Ondas gravitacionales.*
- Jorge Flores Valdes, IF UNAM, *El problema del agente viajero.*
- Ignacio Garzón, IF UNAM, *Nanociencia y nanotecnología.*
- Lauro Oliver Paz Borbón, IF UNAM, *Simulación computacional de nanomateriales: de átomos metálicos a nanopartículas.*
- Francisco Javier Sevilla, IF UNAM, *Sistemas alejados del equilibrio termodinámico: el caso de materia activa.*
- Rosario Paredes, IF UNAM, *Localización y transporte.*
- Víctor Romero, IF UNAM, *Termodinámica de gases cuánticos.*

## Alumnos participantes

Jovany Dávila Quinto	Facultad de Ciencias UNAM
Ana Gabriela Flores Delgado	Universidad Autónoma de Chihuahua
Iván Gamaliel Casasola Rodríguez	Facultad de Ciencias UNAM
Víctor Augusto Samboni Beltrán	Universidad del Cauca, Colombia
Cristina Rodríguez Guijarro	Universidad Autónoma de Zacatecas
Rodrigo Guzmán Castro	Facultad de Ciencias UNAM
Yurani Andrea Giraldo Torres	Universidad Nacional de Colombia
Hernán Enrique Noriega Barros	Universidad del Atlántico, Colombia
José Emmanuel Paredes Rocha	Facultad de Ciencias UNAM
Karen Lozano Méndez	Facultad de Ciencias UNAM
Benito Góngora Servín	Facultad de Ciencias UNAM
Elizabeth Mendoza Sandoval	Facultad de Ciencias UNAM
Luis Alberto Medina Dozal	Universidad Autónoma de Chihuahua
Jonatan Campos Ramírez	Facultad de Ciencias UNAM
Christian Alejandro Benitez Abarca	Facultad de Ciencias UNAM
Luis Joel Hernández Martínez	Facultad de Ciencias UNAM
Juan Antonio Rivera Zavala	Facultad de Ciencias UNAM
José Santiago Villegas Jaime	Universidad Autónoma de Aguascalientes
Jairo C. Peralta Ayala	Universidad Autónoma del Estado de Morelos
Luis Javier Muñoz López	Facultad de Ciencias UNAM
Jonathan Lozano Mayo	Facultad de Ciencias UNAM
Adolfo Rodríguez Méndez	ESFM-IPN
Diana Araceli Vázquez Vargas	Universidad Autónoma de Chihuahua
Diego García Aguilar	Facultad de Ciencias UNAM
Oscar Iván Torres Mena	ESFM-IPN
Eduardo Casas Martínez	ESFM-IPN
Diana Cristina Sánchez Contreras	Instituto Tecnológico de Tláhuac III
Gabriel Alonso Carranco Sapiéns	Facultad de Ciencias UNAM

# Modelos de Estados de Markov en el estudio de cambios conformacionales en proteínas

Marcelino Arciniega Castro

Instituto de Fisiología Celular, Universidad Nacional Autónoma de México,  
Circuito Exterior S/N, Ciudad Universitaria, 04510 Ciudad de México, México.

## Resumen

En los últimos años la construcción de Modelos de Estados de Markov (MEM), a partir de simulaciones de dinámica molecular, ha permitido reproducir la dinámica conformacional de biomacromoléculas en escalas temporales de relevancia biológica. Los MEM son capaces de estimar las propiedades estacionarias y cinéticas en periodos largos, del orden de milisegundos, utilizando un conjunto de simulaciones a nivel atómico que individualmente son mucho más breves. La teoría de Markoviana de procesos estocásticos no sólo facilita el estudio teórico de procesos biomoleculares (tales como plegamiento y función enzimática), sino que además de abre la posibilidad de establecer comparaciones cuantitativas con métodos de la biofísica experimentales a nivel molecular. El presente expone las consideraciones teóricas del uso de MEM en el estudio de macromoléculas.

## Introducción

La función biológica de las que desempeñan las biomoléculas está íntimamente relacionada tanto a su estructura tridimensional como a sus propiedades dinámicas. El término conformación es entendido, geoméricamente, como el conjunto posiciones tridimensionales que poseen cierta similitud estructural entre sí. Sin embargo, desde un punto de vista dinámico, dicha conformación debe de persistir por periodos largos (varios ordenes de magnitud superiores a los periodos de vibración térmica, por ejemplo) de tal manera que el conjunto asociado resulte dinámicamente metaestable. La idea central consiste en describir el comportamiento dinámico macroscópico (la medición experimental) con el comportamiento dinámico microscópico (la simulación computacional) a través del proceso de transición entre subconjuntos metaestables.

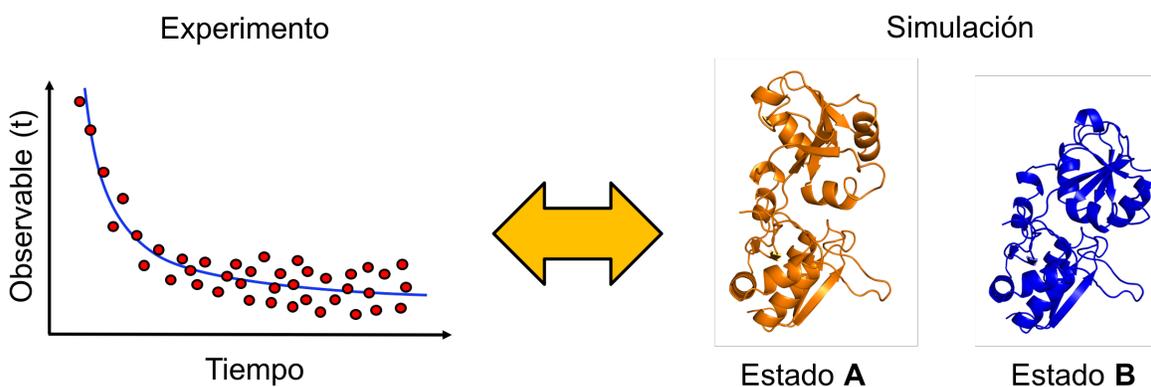
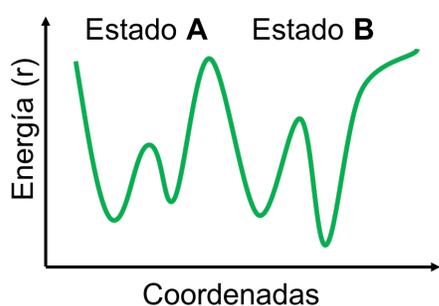


Fig. 1 – La simulación provee interpretaciones moleculares de mediciones experimentales [1].

## Simulaciones de dinámica molecular

La dinámica molecular busca establecer un modelo matemático que describa, hasta cierto detalle, el movimiento del sistema molecular de manera realista. Con enfoque determinista, las simulaciones de dinámica molecular clásica resuelven las ecuaciones de movimiento para un sistema de  $N$  partículas considerando, por medio potenciales por pares, todas las interacciones internas (entre átomos que conforman a la proteína) y externas (entre átomos de la proteína y del solvente). Por tanto, dada ciertas condiciones iniciales  $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0)$  se puede obtener soluciones (numéricas) que describan la evolución temporal del problema. Un sistema molecular que se encuentre en equilibrio térmico mediante establecer contacto con un baño térmico (manteniendo además constante el número de partículas y el volumen) generará una función de densidad de probabilidad en el espacio fase (Función de partición del Ensemble Canónico  $\Leftrightarrow$  Potencial de Helmholtz).



$$F(N, T, V) = -kT \ln Z$$

$$Z = \int e^{-\beta U(r_1, \dots, r_N)} d^N \mathbf{r} \quad U(r_1, \dots, r_N)$$

$$\Delta F_{AB} = -kT \ln \left( \frac{Z_B}{Z_A} \right)$$

Fig. 2 – La física estadística provee fundamento teórico de la conexión entre la simulación de dinámica molecular y los experimentos bioquímicos in-vitro [2].

## Limitaciones de la dinámica molecular

Uno de los principales problemas de la dinámica molecular es su limitado muestreo del espacio de estados. Aunque teóricamente la simulación de un sistema por un periodo infinito logrará visitar la totalidad del espacio de estados, dicha simulación infinita no es factible. Por tanto, usualmente las simulaciones clásicas no proporcionan la estadística suficiente para poder estudiar los procesos de interés.

### Computacionalmente

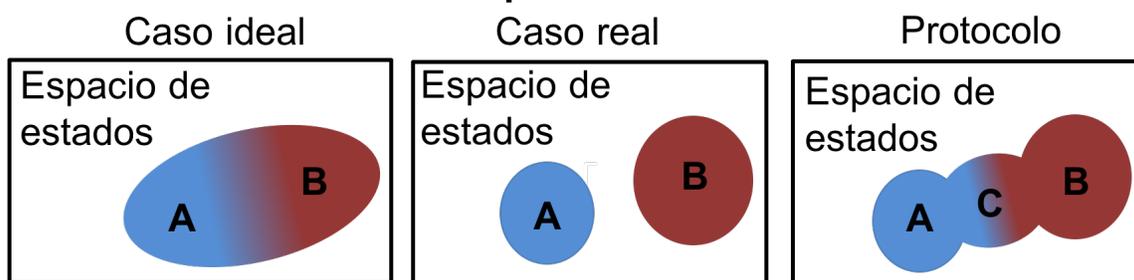


Fig. 3 – Es necesario implementar protocolos que eviten las limitaciones técnicas.

## Modelos de estados de Markov

Considerando la trayectoria del sistema  $\mathbf{x}(t)$  representando el estado del sistema al tiempo  $t \in \Omega$  (Espacio de estados), es posible establecer un proceso estocástico sin memoria

$$p(\mathbf{x}, A; \tau) = \mathbb{P}[\mathbf{x}(t + \tau) \in A | \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}]$$

donde la densidad de probabilidad de transición para cualquier par de estados  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega$

$$p(\mathbf{x}, A; \tau) = \int_A d\mathbf{y} p(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \tau)$$

Las condiciones de equilibrio en el cuales se llevan a cabo los experimentos biológicos justifican que el establecimiento de la hipótesis ergódica.

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt f(\mathbf{x}(t)) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \boldsymbol{\mu}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad ; \quad \text{donde} \quad \int_{\Omega} d\mathbf{x} \boldsymbol{\mu}(\mathbf{x}) = 1.$$

Con  $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{x})$  como la densidad en equilibrio o estacionaria, los procesos de interconversión entre diferentes estados debe estar regido por el equilibrio detallado

$$\boldsymbol{\mu}(\mathbf{x})p(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \tau) = \boldsymbol{\mu}(\mathbf{y})p(\mathbf{y}, \mathbf{x}; \tau)$$

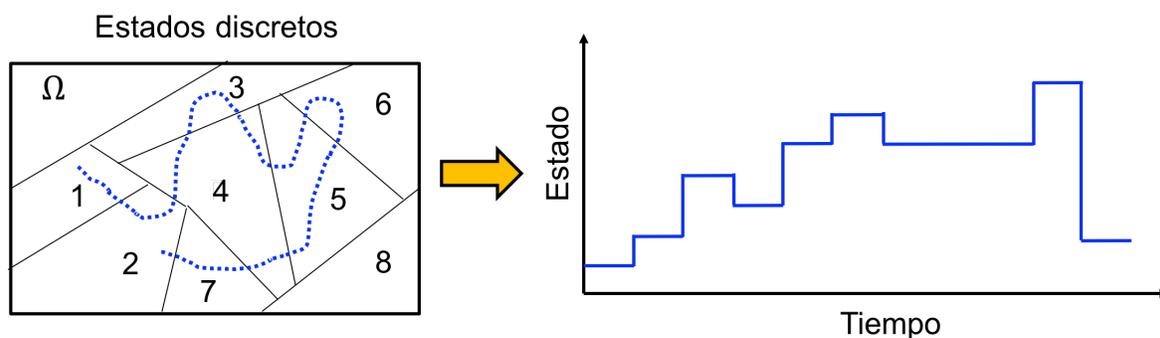


Fig. 4 – La segmentación del espacio de estados permite establecer trayectorias discretas [3].

## Operador de Propagación

Considerando un ensemble de sistemas moleculares en un tiempo dado  $t$ , distribuidos in el espacio de estados  $\Omega$  de acuerdo a una densidad de probabilidad  $p_t(\mathbf{x})$ .

$$p_{t+\tau}(\mathbf{y}) = \mathcal{L}(\tau) \circ p_t(\mathbf{y}) = \int_{\Omega} d\mathbf{x} p(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \tau) p_t(\mathbf{x})$$

La aplicación de  $\mathcal{L}(\tau)$  sobre  $p_t(\mathbf{x})$  modifica la densidad de probabilidad  $p_{t+\tau}(\mathbf{y})$  haciéndola más parecida a  $\mu(\mathbf{x})$ , a la cual debe relajarse en tiempo infinito.

El propagador satisface la ecuación de Chapman-Kolmogorov:

$$p_{t+k\tau}(\mathbf{x}) = [\mathcal{L}(\tau)]^k \circ p_t(\mathbf{x})$$

Y puede ser asociado a sus correspondientes eigenfunciones  $\phi_i$  y eigenvalores  $\lambda_i$ :

$$\mathcal{L}(\tau) \circ \phi_i(\mathbf{x}) = \lambda_i \phi_i(\mathbf{x})$$

La eigenfunción asociada al primer eigenvalor  $\lambda_1$  corresponde a  $\mu(\mathbf{x})$ . Los siguientes eigenvalores estarán asociados con distribuciones correspondientes a procesos de relajación en tiempos finitos.

El operador continuo de propagación facilita el tratamiento matemático y provee elementos para la validación de los modelos de Markov. Sin embargo, la segmentación del espacio de estados, conllevan a su implementación discreta

$$T_{ij}(\tau) = \frac{\mathbb{P}[\mathbf{x}(t + \tau) \in S_j \cap \mathbf{x}(t) \in S_i]}{\mathbb{P}[\mathbf{x}(t) \in S_i]}$$

Esta es la matriz de transición estocástica y contiene la información necesaria para describir proceso bajo estudio, en nuestro caso, las transiciones entre conformaciones biológicamente relevantes para el sistema proteico bajo estudio.

## Comentarios finales

El tratamiento de las simulaciones de dinámica molecular empleando el tratamiento Markoviano a través del operador de propagación resulta bastante atractivo. Si en la práctica se logra establecer una matriz de transición estocástica que aproxime de manera adecuada al operador de propagación, entonces es posible estudiar procesos de relevancia biológica, tales como diferencias de energía libre y/o caminos de transición entre dos conformaciones. Sin embargo, establecer la matriz de transición estocástica que satisfaga las condiciones teóricas no es una tarea sencilla.

## Referencias

1. T. Schlick, *Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide*, Vol. 21, 2nd ed., Springer, Berlin, 2002.
2. M. E. Tuckerman, *Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation*, Oxford University Press, Oxford, 2010.
3. G. R. Bowman, V. S. Pande and F. Noé, eds., *Introduction to Markov State Models and Their Application to Long Molecular Simulation*, Adv. In Experimental Medicine and Biology, 797, Springer, Berlin, 2014.

# Aplicaciones de plasmas fríos

Horacio Martínez Valencia

En esta plática se abordaron los trabajos de investigación más relevantes que se llevan a cabo en los laboratorios de espectroscopia y óptica del ICF. Estos trabajos incluyeron temas como física de plasmas de baja temperatura, procesos de interacción luz-materia y caracterización-modificación de superficies en sólidos por medio de su interacción que plasmas. Además, se abordaron técnicas de análisis químico implementadas en los laboratorios mencionados como espectroscopia infrarroja (IR), espectroscopia Raman, y espectroscopia de rompimiento inducido por láser (LIBS).

Al final de la plática se organizó una visita a los laboratorios de espectroscopia y óptica en donde los participantes de la escuela de verano interaccionaron con algunos de los experimentos mencionados en la charla.

A continuación, se describen brevemente algunos de los trabajos más relevantes que se mostraron en la presentación:

## **Tratamiento de superficies mediante su interacción con plasmas fríos.**

En la charla se abordó el estudio de la modificación superficial de materiales – como metales y polímeros – y películas delgadas al ser sometidas a plasmas de descarga eléctrica generadas en atmósferas controladas. Dicha interacción modifica propiedades mecánicas y químicas de los materiales, mejorando sus propiedades y permitiendo su uso en aplicaciones diversas.

Como ejemplos ilustrativos se abordó el tratamiento de películas delgadas para mejorar sus propiedades ópticas y ser utilizadas en celdas solares; así como el tratamiento mediante plasmas fríos de membranas poliméricas para modificar su hidrofobicidad.

## **Tratamiento de aguas residuales por medio de plasmas fríos**

Otro de los proyectos mencionados en la charla fue la aplicación de plasmas de descarga para el tratamiento de aguas contaminadas por colorantes. Se abordó en particular el trabajo realizado sobre aguas contaminadas con colorantes utilizados en la industria textil en donde el plasma es capaz de degradar de forma eficiente dicho colorante alcanzando remociones mayores al 95%.

## **Espectroscopia Raman e IR**

Las espectroscopias Raman e infrarroja, técnicas complementarias entre sí, proveen información de la estructura y la composición a nivel molecular de los materiales analizados gracias a su interacción

con la radiación electromagnética. En la charla se abordaron los principios básicos de las técnicas y se enfatizó en el uso de estas técnicas en algunas de las aplicaciones que se han realizado en los laboratorios de espectroscopia. Estas técnicas analíticas representan herramientas esenciales en la caracterización de los materiales que se estudian en el laboratorio ya que nos muestran las modificaciones que presentan los materiales al estar expuestos a los plasmas fríos.

## **Espectroscopia LIBS**

La espectroscopia de rompimiento inducido por láser (LIBS), recién implementada en el laboratorio de óptica, representa una técnica analítica que provee información elemental respecto a la composición química de materiales. Esta información se obtiene a partir de la emisión los átomos presentes en un plasma generado a partir de la interacción de un pulso láser con el material a analizar (generalmente la superficie de un sólido).

En la charla se abordaron los conceptos básicos de la técnica, así como su instrumentación básica y el estado del arte enfocado a las aplicaciones de LIBS más sobresalientes como pre-ambulo para discutir uno de los proyectos principales que se desarrollan en el laboratorio de óptica.

El proyecto está relacionado con el análisis de muestras líquidas, estado de la materia en donde la técnica LIBS presenta una sensibilidad limitada principalmente a las pérdidas de energía asociadas a las propiedades físicas de los líquidos (evaporación del líquido, producción de ondas mecánicas, salpicaduras que reducen el tiempo de vida del plasma, etc.). Para evitar dichas pérdidas de energía se recurre a la implementación de levitación acústica de las muestras líquidas, lo que permite reconcentrar los analitos de interés al disminuir el volumen del líquido luego de un secado parcial de la gota levitada, y de esta forma mejorar la señal LIBS obtenida.

Al final de la charla, los participantes de la XXV escuela de verano acudieron al laboratorio de óptica del ICF en donde presenciaron el fenómeno de la levitación acústica de muestras líquidas, además de interaccionar con la instrumentación óptica, mecánica y electrónica de la técnica LIBS y el sistema de levitación ultrasónico.

# Fundamentos de ondas gravitacionales

Juan Carlos Degollado  
jcdegollado@icf.unam.mx

## 1 Introducción

Las ondas gravitacionales son producidas por masas aceleradas, de forma semejante que las ondas electromagnéticas se producen por cargas aceleradas. Debido a que la gravedad es la más débil de las cuatro interacciones fundamentales, las ondas gravitacionales tienen amplitudes muy pequeñas. Por ejemplo, una onda gravitacional intensa produciría desplazamientos del orden de  $10^{-18}$  metros (esto es una cantidad mil veces más pequeña que el diámetro máximo estimado para el protón). Ondas de tal intensidad se producen como resultado de sistemas muy masivos que experimentan grandes aceleraciones. Un ejemplo de este tipo de sistemas son dos agujeros negros en órbita casi a punto de fusionarse.

El 11 de febrero de 2016 la colaboración LIGO (Láser Interferometer Gravitational-Wave Observatory) comunicó la primera detección directa de ondas gravitacionales. Esta detección representa una confirmación directa de una predicción de la relatividad general de Einstein formulada hace más de cien años y por eso es de gran relevancia en la física actual.

El nombre que se le asignó a la señal fue GW150914 que significa que la onda gravitacional se detectó en 2015 en septiembre 14. De acuerdo con los análisis presentados por la colaboración, la señal es consistente con las predicciones de relatividad general sobre la forma de onda producida por la fusión de dos agujeros negros así como la subsecuente relajación hacia un único agujero negro. Esta detección constituye la primera evidencia de la existencia de las ondas gravitacionales y mas aun, es la primera observación directa de la colisión de dos agujeros negros. La señal fue detectada por los dos detectores que conforman LIGO, uno en Handford estado de Washington y el otro en Livingston estado de Louisiana. Las ondas gravitacionales que se detectaron son consistentes con la señal producida por la colisión de dos agujeros negros de masas 36 y 29 veces la masa del sol [2, 3]. Los agujeros negros estaban orbitando alrededor de su centro de masa a una distancia de aproximadamente 350 km hasta que colisionaron y formaron un solo agujero negro.

La deducción sobre las propiedades de la fuente que produjo estas ondas gravitacionales se hizo a través de herramientas teóricas, analíticas y computacionales. Por ejemplo, se crearon plantillas mediante simulaciones numéricas al resolver las ecuaciones de Einstein y se desarrollaron algoritmos muy eficientes de análisis de datos [4]. El evento GW150914 permitió en particular probar las predicciones hechas por la relatividad general en el régimen de gravedad intensa. La señal fue lo suficientemente clara para diseñar algunas pruebas de consistencia con las predicciones de la relatividad. Los resultados principales se obtuvieron al comparar la señal detectada con la fase y amplitud de la onda predicha por las simulaciones numéricas. Estas comparaciones permitieron estimar los parámetros del sistema binario tal como la masa de los agujeros negros originales, su distancia a la Tierra y el momento angular intrínseco o *espín* del agujero negro resultante [5].

Aquí presentamos algunos de los fundamentos de la teoría de las ondas gravitacionales que le ayudarán al lector a entender los principios básicos de uno de los descubrimientos más importantes de nuestros tiempos.

## 2 El formalismo de las ondas gravitacionales

Las ondas gravitacionales se producen por la aceleración de masas y se propagan a la velocidad de la luz. Su detección ha resultado muy difícil porque casi no interactúan con la materia y su intensidad es muy pequeña cuando nos llegan. Los eventos mas extremos del universo como la colisión de dos agujeros negros o estrellas de neutrones solamente producirán variaciones en longitud del orden de  $10^{-21}$  en los detectores sobre la Tierra.

Las ondas gravitacionales se caracterizan por las siguientes propiedades:

- Viajan a la velocidad de la luz.

- Son transversas a la dirección de propagación.
- Tienen dos estados de polarización independientes
- Transportan energía desde el sistema que las produce.
- Pueden detectarse por el efecto que causan sobre partículas en caída libre.

Para hacer un estudio de las ondas gravitacionales es necesario utilizar la relatividad general de Einstein. La relatividad es un teoría no lineal así que no es fácil distinguir entre fenómenos radiativos, de campo débil, y de bulto, de campo fuerte. Sin embargo, si es posible entender fenómenos ondulatorios bajo ciertos escenarios. Aquí nos centraremos en la descripción perturbativa en un espacio tiempo de fondo plano de Minkowski.

Si el campo gravitacional no es muy intenso, es posible encontrar un sistema de coordenadas cartesianas tal que el tensor métrico  $g_{\mu\nu}$  está compuesto por la métrica de Minkowski  $\eta_{\mu\nu}$ , mas perturbaciones  $h_{\mu\nu}$ , de la forma:

$$g_{\mu\nu} = \eta_{\mu\nu} + h_{\mu\nu} , \quad |h_{\mu\nu}| \ll 1. \quad (1)$$

Supondremos de aquí en adelante que  $h_{\mu\nu}$  es un tensor de tipo (0,2) en el espacio tiempo de Minkowski como fondo. De esta forma, la métrica  $\eta_{\mu\nu}$ , y su inversa  $\eta^{\mu\nu}$ , se utilizarán para bajar y subir índices.

Bajo estas consideraciones podemos linealizar las ecuaciones de campo de Einstein. Comencemos con el tensor de Ricci. Despreciando los términos a segundo orden en  $h_{\mu\nu}$  queda como:

$$R_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (\partial_\alpha \partial_\mu h^\alpha{}_\nu + \partial_\alpha \partial_\nu h^\alpha{}_\mu - \partial_\mu \partial_\nu h^\alpha{}_\alpha - \square h_{\mu\nu}) + O(h^2) , \quad (2)$$

en donde el operador d'Alambert en el espacio plano es  $\square := \eta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu$ . La parte lineal del escalar de Ricci, definido como  $R := \eta^{\mu\nu} R_{\mu\nu}$  es:

$$R = \eta^{\mu\nu} R_{\mu\nu} + O(h^2) = \partial_\mu \partial_\nu h^{\mu\nu} - \square h_{\mu\nu} + O(h^2) . \quad (3)$$

Finalmente el tensor de Einstein  $G_{\mu\nu} := R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} R g_{\mu\nu}$ , a orden lineal es:

$$G_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (\partial_\alpha \partial_\mu h^\alpha{}_\nu + \partial_\alpha \partial_\nu h^\alpha{}_\mu - \partial_\mu \partial_\nu h^\alpha{}_\alpha - \square h_{\mu\nu} + \eta_{\mu\nu} (\square h - \partial_\alpha \partial_\beta h^{\alpha\beta})) + O(h^2) . \quad (4)$$

Es aún posible simplificar la versión linealizada del tensor de Einstein introduciendo la siguiente función conocida como la *perturbación de traza reversa*

$$\bar{h}_{\mu\nu} := h_{\mu\nu} - \frac{1}{2} \eta_{\mu\nu} h . \quad (5)$$

Sustituyendo en la expresión (4) se obtiene

$$G_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (\partial_\alpha \partial_\mu \bar{h}^\alpha{}_\nu + \partial_\alpha \partial_\nu \bar{h}^\alpha{}_\mu - \square \bar{h}_{\mu\nu} - \eta_{\mu\nu} \partial_\alpha \partial_\beta \bar{h}^{\alpha\beta}) + O(h^2) . \quad (6)$$

Utilizando una transformación infinitesimal de coordenadas  $x'^\alpha \rightarrow x^\alpha$ , conocida como *transformación de norma* dada por:

$$x'^\alpha = x^\alpha + \xi^\alpha(x^\beta) , \quad (7)$$

podemos elegir un sistema en el cual se siguen las siguientes condiciones:

$$\partial_\beta \bar{h}^{\beta\alpha} = 0 . \quad (8)$$

A la elección anterior se le conoce como norma armónica. El tensor de Einstein en esta norma se simplifica considerablemente:

$$G_{\mu\nu} = -\frac{1}{2} \square \bar{h}_{\mu\nu} + O(h^2) . \quad (9)$$

Finalmente, podemos escribir las ecuaciones de Einstein a orden lineal en la perturbación:

$$\square \bar{h}_{\mu\nu} = -\frac{16\pi G}{c^4} T_{\mu\nu} . \quad (10)$$

Como resultado, las soluciones dependientes del tiempo de las ecuaciones (10) pueden interpretarse como ondas gravitacionales débiles. La solución más simple a estas ecuaciones en vacío ( $T_{\mu\nu} = 0$ ) es una onda plana monocromática de la forma:

$$\bar{h}_{\mu\nu} = A_{\mu\nu} \cos(k_\alpha x^\alpha) . \quad (11)$$

$A_{\mu\nu}$  es un tensor de amplitud constante y hemos escogido por simplicidad que la fase inicialmente es cero. Cuando se sustituyen las soluciones (11) en las ecuaciones (10) se obtiene la condición:

$$\eta^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta = 0 , \quad (12)$$

por lo que  $k^\alpha$  son componentes de un vector nulo. De donde se confirma que la velocidad de propagación de las ondas es la velocidad de la luz. Las ecuaciones de Einstein tienen la forma simple (10) si las condiciones para la norma armónica (8) se satisfacen. Esto lleva al requerimiento que la solución de onda plana  $\bar{h}_{\mu\nu}$  es ortogonal a  $k^\nu$ :

$$\bar{h}_{\mu\nu} k^\nu = 0 . \quad (13)$$

Podemos concluir de esta expresión que las ondas gravitacionales son transversales. Si introducimos la frecuencia de las ondas como la componente cero del cuadvivector  $k^\nu$   $\omega = ck^0$  y la frecuencia medida en hertz  $f$ , mediante  $\omega = 2\pi f$ , las componentes espaciales de  $k^\mu$  forman el vector de onda, que apunta en la dirección de propagación. Su longitud euclídea está relacionada con la longitud de onda  $\lambda$ , mediante  $\lambda = 2\pi/|k^i|$ .

Los grados de libertad reales del campo  $h_{\mu\nu}$  se representan mejor escogiendo un sistema de coordenadas adecuado como mostraremos a continuación. Para cada evento del espacio tiempo descrito por las coordenadas  $x^\alpha$  escogamos un vector  $u^\mu$  y consideremos una transformación de norma generada por las funciones  $\xi^\alpha$  de la forma:

$$\xi^\alpha = B^\alpha \cos(k_\beta x^\beta) . \quad (14)$$

Es posible elegir las cantidades  $B^\alpha$  de tal forma que en el nuevo sistema armónico  $x'^\alpha = x^\alpha + \xi^\alpha$  las siguientes condiciones se satisfacen [9]:

$$\bar{h}'_{\mu\nu} u'^{\nu} , \quad \bar{h}'_{\mu}{}^{\mu} = 0 . \quad (15)$$

En particular las ecuaciones (14) preservan las condiciones:

$$\bar{h}'_{\mu\nu} k'^{\nu} = 0 , \quad (16)$$

y

$$\bar{h}'_{\mu\nu} = \bar{h}_{\mu\nu} . \quad (17)$$

Las ecuaciones (15) definen el sistema *transverso y sin traza* (TT) para el vector  $u^\mu$ . Estas ecuaciones representan 8 constricciones sobre las componentes de las funciones  $\bar{h}'_{\mu\nu}$ , cualquier onda gravitacional plana y monocromática posee únicamente dos grados de libertad independientes. Estos grados de libertad son las polarizaciones de la onda. La forma más simple de describir las dos polarizaciones de una onda gravitacional es escogiendo al vector  $u^\mu$  de la forma  $u^\mu = (1, 0, 0, 0)$ . En este sistema el tensor de perturbación satisface que:

$$\bar{h}_{\mu 0} = 0 . \quad (18)$$

De aquí en adelante omitiremos la barra de  $h_{\mu\nu}$  ya que  $\bar{h}_{\mu\nu}$  y  $h_{\mu\nu}$  coinciden en el sistema TT. Si suponemos que la onda gravitacional se propaga en la dirección  $+z$ , el cuadvivector de onda  $k^\mu = (\omega/c, 0, 0, \omega/c)$  y

$$h_{\mu 3} = 0 . \quad (19)$$

La condición de traza nula se reduce a

$$h_{11} + h_{22} = 0 . \quad (20)$$

Es muy común en la literatura denotar a las componentes independientes del tensor de perturbación como:

$$h_+ = h_{11} = -h_{22} , \quad h_\times = h_{12} = h_{21} . \quad (21)$$

Las funciones  $h_+$  y  $h_\times$  se conocen como polarización *mas* y polarización *cruz* de la onda gravitacional. La forma de onda en el sistema TT se puede representar en forma de una matriz como:

$$h_{\mu\nu}^{TT}(t, \vec{x}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_+(t - z/c) & h_\times(t - z/c) & 0 \\ 0 & h_\times(t - z/c) & -h_+(t - z/c) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} ,$$

en donde

$$h_+ = A_+ \cos\left(\omega\left(t - \frac{z}{c}\right)\right) , \quad h_\times = A_\times \cos\left(\omega\left(t - \frac{z}{c}\right)\right) , \quad (22)$$

$A_+$  y  $A_\times$  son las amplitudes de la onda.

### 3 Respuesta de las partículas de prueba ante el paso de una onda gravitacional

De acuerdo con el principio de equivalencia, los efectos de la gravedad pueden transformarse y los efectos de una onda gravitacional sobre una sola partícula de prueba no tienen consecuencias medibles. Las coordenadas de una partícula de prueba permanecen sin cambio ante el paso de una onda gravitacional [10].

Las ondas gravitacionales pueden detectarse solamente por su influencia sobre dos o más partículas en diferentes posiciones. Las propiedades de las ondas gravitacionales, como su frecuencia o su amplitud están relacionadas con el movimiento de las masas de prueba involucradas y por lo tanto los detectores de ondas gravitacionales interferométricos son dispositivos diseñados para medir cambios relativos en su longitud [11].

Las ondas gravitacionales representan perturbaciones de curvatura y su efecto sobre partículas de prueba es a través de efectos de marea. Para entender mejor esta afirmación consideremos dos partículas que siguen dos geodésicas cercanas y ambas están parametrizadas por el mismo parámetro  $\lambda$ . Sea  $s^\mu$  el vector que conecta dos puntos sobre las curvas con el mismo valor de  $\lambda$ . La ecuación que nos dice como cambia este vector con la geometría del espacio tiempo es *la ecuación de desviación geodésica*

$$\frac{d^2 s^\mu}{d\lambda^2} + R^\mu_{\alpha\nu\beta} u^\alpha s^\nu u^\beta = 0, \quad (23)$$

en donde  $u^\mu$  es el vector tangente a las geodésicas [12].

El efecto real de una onda gravitacional sobre un conjunto de partículas se puede entender a partir de esta ecuación que en la teoría lineal es

$$\frac{d^2 s^k}{dt^2} = -R^k_{ijt} s^j. \quad (24)$$

Sustituyendo las componentes del tensor de Riemann en términos de la función de onda en la norma TT se obtiene:

$$s^k{}_{,tt} = \frac{1}{2} s^k h^{\text{TT}}_{ij,tt}. \quad (25)$$

Veamos el efecto que tiene el paso de una onda gravitacional sobre un anillo de partículas libres. Supongamos que a  $t = 0$ , llega una onda gravitacional, de modo que para tiempos  $t \leq 0$ ,  $h^{\text{TT}}_{ij} = 0$ ,

$$s^i(t) = s^i_0 = \text{cte}, \quad t \leq 0. \quad (26)$$

Esperamos que  $s^i(t) = s^i_0 + O(h)$  para  $t > 0$  por lo que podemos escribir:

$$\frac{d^2 s^i}{dt^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 h^{\text{TT}}_{ij}}{\partial t^2} s^j, \quad \rightarrow \quad \frac{d^2 s^i}{dt^2} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 h^{\text{TT}}_{ij}}{\partial t^2} s^j_0, \quad (27)$$

que puede integrarse de forma inmediata

$$s^i(t) = \left( \delta^i_j + \frac{1}{2} h^i_j(t) \right)^{\text{TT}} s^j_0, \quad t > 0 \quad (28)$$

Si orientamos los ejes espaciales del sistema de referencia propio de tal forma que la onda se propague en dirección  $+z$ . Podemos escribir:

$$h^{\text{TT}}_{\mu\nu}(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_+(t) & h_\times(t) & 0 \\ 0 & h_\times(t) & -h_+(t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Las posiciones (28) quedan como

$$s^x(t) = s^x_0 + \frac{1}{2} [h_+(t)s^x_0 + h_\times(t)s^y_0], \quad (29)$$

$$s^y(t) = s^y_0 + \frac{1}{2} [h_\times(t)s^x_0 - h_+(t)s^y_0]. \quad (30)$$

Supongamos que tenemos un conjunto de partículas libres y que están situadas sobre un anillo en el plano  $(x, y)$ . Las coordenadas de cada partícula sobre el anillo pueden parametrizarse por un ángulo  $\phi \in [0, 2\pi]$  de forma que las componentes de su vector posición son:

$$s_0^x = r_0 \cos \phi, \quad s_0^y = r_0 \sin \phi, \quad s_0^z = 0. \quad (31)$$

Primero, notamos que el anillo permanecerá en el plano  $(x, y)$  ya que para todo tiempo

$$s^z(t) = 0. \quad (32)$$

Segundo, estudiemos el efecto de una onda gravitacional con sólo una polarización. La onda gravitacional está en el modo  $+$  cuando  $h_{\times} = 0$ . Utilizando las ecuaciones (28) se obtiene

$$s^x(t) = r_0 \cos \phi \left( 1 + \frac{1}{2} h_+(t) \right), \quad (33)$$

$$s^y(t) = r_0 \sin \phi \left( 1 - \frac{1}{2} h_+(t) \right). \quad (34)$$

En  $t = 0$  las partículas sobre un anillo perfectamente circular ( $h_+(0) = 0$ ), pero cuando pasa la onda, la forma se ve modificada. Podemos obtener la forma del anillo notando que la trayectoria resultante se escribe como

$$\frac{(s^x)^2}{(a_+(t))^2} + \frac{(s^y)^2}{(b_+(t))^2} = 1, \quad (35)$$

en donde

$$a_+(t) := r_0 \left( 1 + \frac{1}{2} h_+(t) \right), \quad b_+(t) := r_0 \left( 1 - \frac{1}{2} h_+(t) \right). \quad (36)$$

Las ecuación (35) describe una elipse cuyo centro es el origen del sistema de coordenadas. Los semi-ejes de la elipse  $a_+(t)$  y  $b_+(t)$  son paralelos a los ejes  $x$  y  $y$  respectivamente. Si  $h_+(t)$  es una función oscilatoria, que cambia de signo con el tiempo (¡una onda!), la deformación del círculo inicial será sigue:

$$a_+(t) := r_0 \left( 1 + \frac{1}{2} h_+(t) \right), \quad b_+(t) := r_0 \left( 1 - \frac{1}{2} h_+(t) \right) \quad (37)$$

- En los intervalos de tiempo en los que  $h_+(t) > 0$ , el círculo se estira en la dirección  $x$  y se comprime en la dirección  $y$ .
- Cuando  $h_+(t) < 0$  la compresión es a lo largo del eje  $y$  y el estiramiento es en la dirección  $x$ .

La onda gravitacional está en la polarización  $\times$  cuando  $h_+ = 0$  de modo que

$$s^x(t) = r_0 \left( \cos \phi + h_{\times}(t) \frac{1}{2} \sin \phi, \right) \quad (38)$$

$$s^y(t) = r_0 \left( \sin \phi + h_{\times}(t) \frac{1}{2} \cos \phi, \right) \quad (39)$$

Introduzcamos en el plano  $(x, y)$  unas nuevas coordenadas  $(x', y')$  relacionadas con las anteriores pero rotadas alrededor del eje  $z'$  por un ángulo de  $\alpha = 45$  grados

$$\begin{pmatrix} s^{x'} \\ s^{y'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s^x \\ s^y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s^x \\ s^y \end{pmatrix}$$

Si reescribimos las trayectorias en términos de las coordenadas  $(\hat{x}', \hat{y}')$  nos queda

$$s^{x'}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} r_0 (\sin \phi + \cos \phi) (1 + h_{\times}(t)), \quad (40)$$

$$s^{y'}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} r_0 (\sin \phi - \cos \phi) (1 - h_{\times}(t)), \quad (41)$$

y después de eliminar el parámetro  $\phi$  se obtiene

$$\frac{(s^{x'})^2}{(a_{\times}(t))^2} + \frac{(s^{y'})^2}{(b_{\times}(t))^2} = 1, \quad (42)$$

con

$$a_{\times}(t) := r_0 \left( 1 + \frac{1}{2} h_{\times}(t) \right), \quad b_{\times}(t) := r_0 \left( 1 - \frac{1}{2} h_{\times}(t) \right). \quad (43)$$

Que tienen la misma forma que la polarización +. El anillo circular inicial se deformará en una elipse cuyo centro es el origen pero cuyos ejes están rotados 45 grados con respecto a los ejes  $x$ ,  $y$ .

En la siguiente sección describiremos como estimar la cantidad de energía que se radía como ondas gravitacionales cuando una masa se acelera.

## 4 Energía y momento transportado por ondas gravitacionales

Debido a la naturaleza global de la interacción gravitacional, no es posible determinar la energía de una onda gravitacional en una región del tamaño de una sola longitud de onda. Sin embargo, si podemos calcular la energía contenida en una región del espacio que se extiende sobre varias longitudes de onda. Es posible asociar un tensor de energía momento a las ondas gravitacionales  $t_{\mu\nu}$ , promediando el gradiente al cuadrado del campo de onda sobre varias longitudes de onda. En la norma TT se escribe se hace mediante la siguiente expresión:

$$t_{\mu\nu} = \frac{c^4}{32\pi G} \langle \partial_{\mu} h_{ij}^{\text{TT}} \partial_{\nu} h_{ij}^{\text{TT}} \rangle. \quad (44)$$

Si además  $h_{0\mu}^{\text{TT}} = 0$ , entonces

$$t_{\mu\nu} = \frac{c^4}{32\pi G} \sum_{i,j=1}^3 \langle \partial_{\mu} h_{ij}^{\text{TT}} \partial_{\nu} h_{ij}^{\text{TT}} \rangle. \quad (45)$$

Para una onda plana que se propaga en la dirección  $+z$ , las componentes diferentes de cero del tensor  $t_{\mu\nu}$  son:

$$t_{00} = -t_{0z} = -t_{z0} = t_{zz} = \frac{c^2}{16\pi G} \langle (\partial_t h_+)^2 + (\partial_t h_{\times})^2 \rangle. \quad (46)$$

Es posible obtener un resultado interesante si consideramos por simplicidad una onda monocromática como (11) y sustituimos su expresión en la ecuación previa:

$$t_{00} = \frac{c^2 \omega^2}{16\pi G} (A_+^2 \langle (\sin^2(\omega(t - z/c))) \rangle + A_{\times}^2 \langle (\sin^2(\omega(t - z/c))) \rangle). \quad (47)$$

El promedio sobre la función seno sobre un periodo da  $1/2$  y simplificando se obtiene la densidad de energía:

$$t_{00} = \frac{\pi c^2 f^2}{8G} (A_+^2 + A_{\times}^2). \quad (48)$$

Con esta expresión podemos obtener algunos ordenes de magnitud. Por ejemplo, el flujo de energía gravitacional producida por el colapso de un núcleo de supernova para formar un agujero negro de 10 masas solares a una distancia de 15 Mpc tiene frecuencias del orden de  $10^3$  Hz y amplitudes del orden de  $A_+ \sim A_{\times} \sim 10^{-22}$ . El flujo de energía gravitacional obtenido es del orden de  $3 \text{ ergs/cm}^2 \text{ s}$  que es como diez ordenes de magnitud mas grande que el flujo de energía electromagnética reportado para un clapso de supernova [9].

## 5 Aproximación cuadrupolar

Una de las técnicas más simples para modelar la generación de ondas gravitacionales es el formalismo cuadrupolar. Este formalismo es muy importante porque es muy preciso para muchas fuentes astrofísicas y es relativamente fácil de utilizar. La hipótesis principal de aplicabilidad es que la velocidad a la que se mueven las fuentes es pequeña comparada con la velocidad de la luz. Este requerimiento es equivalente a pedir que la longitud de onda característica de la onda gravitacional emitida es mucho mas grande que su tamaño característico  $L_s$ ,  $\lambda \gg L_s$ .

El multipolo más bajo para la radiación gravitacional es el cuadrupolo. No existe radiación monopolar como resultado de la conservación de la masa. Tampoco hay radiación dipolar como consecuencia de la conservación de momento. Para comenzar con el formalismo cuadrupolar, comencemos introduciendo un

sistema coordenado  $(t, \vec{x}')$  centrado en la fuente de la onda gravitacional. Si suponemos que la fuente tiene una atracción gravitacional débil, la teoría newtoniana será una buena aproximación para la relatividad general dentro y cerca de la fuente.

Supongamos que un observador en reposo –con respecto a la fuente– detecta el campo de onda  $h_{\mu\nu}^{\text{TT}}$ , el formalismo cuadrupolar nos brinda una expresión para ese campo en términos del contenido de materia mediante:

$$h_{ij}^{\text{TT}}(t, x^i) = \frac{2}{R} \frac{G}{c^4} \ddot{Q}_{ij}^{\text{TT}} \left( t - \frac{R}{c} \right). \quad (49)$$

En donde  $R$  es la distancia euclídea del punto  $x^i$  al centro de la fuente y  $t$  es el tiempo propio medido por el observador. La cantidad  $Q_{ij}$  es la parte simétrica del segundo momento de la densidad de masa del sistema,  $\rho$ . En coordenadas cartesianas se calcula mediante la expresión:

$$Q_{ij}^{\text{TT}} = \int dV \rho \left( x_i x_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} r^2 \right). \quad (50)$$

Esta expresión debe ser evaluada en el tiempo retardado  $t_{ret} = t - \frac{R}{c}$ . El superíndice TT significa que es necesario conservar la parte que es transversal a la dirección de propagación de la onda y no tiene traza. La cantidad  $Q_{ij}$  es la que aparece al hacer una descomposición del potencial newtoniano es decir, la asociada con el cuadrupolo [12].

$$\Phi = -\frac{GM}{r} - \frac{3G}{2} \frac{Q_{ij} x^i x^j}{r^5} - \frac{5G}{2} \frac{Q_{ijk} x^i x^j x^k}{r^7} + \dots \quad (51)$$

La tasa de emisión de la energía  $\mathcal{F}_E$  y momento angular  $\mathcal{F}_{J_i}$  transportados por la onda gravitacional en la aproximación cuadrupolar son [9]:

$$\mathcal{F}_E = \frac{G}{5c^5} \sum_{i,j=1}^3 \langle (\ddot{Q}_{ij})^2 \rangle, \quad (52)$$

y

$$\mathcal{F}_{J_i} = \frac{2G}{5c^5} \sum_{j,k,l=1}^3 \epsilon_{ijk} \langle \ddot{Q}_{jl} \ddot{Q}_{kl} \rangle. \quad (53)$$

$\epsilon_{ijk}$  es el símbolo de Levi-Civita [10] y los puntos sobre las variables indican derivadas con respecto al tiempo. La tasa a la que a fuente pierde energía y momento angular debe ser igual a menos la tasas dadas por las ecuaciones (52) and (53) por lo que las las ecuaciones de pérdida de masa y momento angular de la fuente son:

$$\frac{dE^{\text{fuente}}}{dt} = -\frac{G}{5c^5} \sum_{i,j=1}^3 \langle (\ddot{Q}_{ij})^2 \rangle, \quad (54)$$

y

$$\frac{dJ_i^{\text{fuente}}}{dt} = -\frac{2G}{5c^5} \sum_{j,k,l=1}^3 \epsilon_{ijk} \langle \ddot{Q}_{jl} \ddot{Q}_{kl} \rangle. \quad (55)$$

La energía y momento angular radiada calculadas utilizando las ecuaciones (54) y (55) serán precisas siempre y cuando la longitud de la onda sea mucho mayor que el tamaño característico de la fuente  $L_s$ . A continuación mostraremos un ejemplo en el que utilizamos la fórmula cuadrupolar para calcular la energía radiada por un sistema de objetos compactos orbitando entre si.

## 6 El sistema de dos cuerpos en órbita

Una de las aplicaciones más importantes del formalismo cuadrupolar como aproximación a la relatividad general es el problema de la emisión gravitacional de dos cuerpos en órbita. Este problema consiste en describir la dinámica de dos cuerpos que orbitan uno con respecto a otro y caracterizar a radiación gravitacional que se emite en el proceso. El cálculo se hace utilizando a gravedad descrita por Newton para la dinámica de los cuerpos y la fórmula cuadrupolar para la radiación. Esta descripción es válida cuando la velocidad relativa del sistema binario es pequeña comparada con la velocidad de la luz y cuando la energía potencial gravitacional es grande comparada con la masa en reposo de los cuerpos.

A continuación daremos una descripción de un sistema binario y la radiación gravitacional que emiten mientras están en órbita.

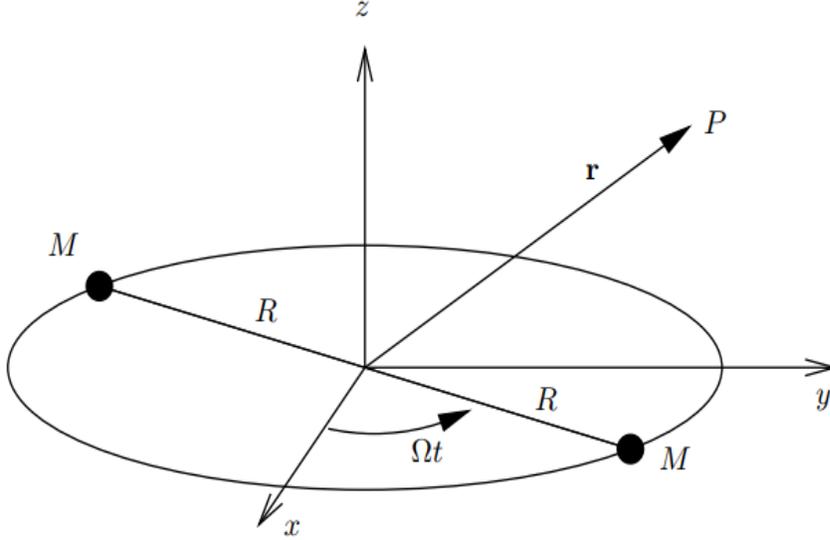


Fig. 1: Dos cuerpos que orbitan uno con respecto al otro siguiendo trayectorias circulares.

Un sistema binario newtoniano se ilustra en la Fig. 1. Por simplicidad, suponemos que los cuerpos siguen órbitas circulares y tienen masas iguales:

$$M_1 = M_2 = M, \quad \text{y} \quad R_1 = R_2 = R. \quad (56)$$

En las coordenadas mostradas en la figura

$$x_1(t) = R \cos \Omega t, \quad y_1(t) = R \sin \Omega t, \quad z_1(t) = 0. \quad (57)$$

$$x_2(t) = -R \cos \Omega t, \quad y_2(t) = -R \sin \Omega t, \quad z_2(t) = 0. \quad (58)$$

Las componentes diferentes de cero del momento cuadrupolar (50) son:

$$Q_{xx} = MR^2 \left( \frac{1}{3} + \cos 2\Omega t \right), \quad Q_{yy} = MR^2 \left( \frac{1}{3} - \cos 2\Omega t \right), \quad Q_{zz} = -\frac{2}{3} MR^2. \quad (59)$$

en donde  $\rho = M\delta(r_i - r_i(t))$ . La luminosidad de una fuente por ondas gravitacionales se define mediante su pérdida de energía  $L_{gw} = -\frac{dE^{\text{source}}}{dt}$ . Para el sistema binario que nos ocupa:

$$L_{gw} = \frac{G}{5c^5} \langle \ddot{Q}^{ij} \ddot{Q}_{ij} \rangle \quad (60)$$

$$= \frac{G}{5c^5} \langle (\ddot{Q}_{xx})^2 + 2(\ddot{Q}_{xy})^2 + (\ddot{Q}_{yy})^2 + (\ddot{Q}_{zz})^2 \rangle \quad (61)$$

$$= \frac{128G}{5c^5} \Omega^6 M^2 R^4. \quad (62)$$

La frecuencia  $\Omega$  y el periodo  $T$  están relacionados como  $\Omega = 2\pi/T$ . Si además utilizamos la tercera ley de Kepler,  $R^3 = \frac{GMT^2}{16\pi^2}$ , la luminosidad en ondas gravitacionales es

$$L_{gw} = \frac{128}{5} 2^{2/3} \frac{c^5}{G} \left( \frac{\pi GM}{c^3 T} \right)^{10/3}. \quad (63)$$

$$(64)$$

Esta puede ser una cantidad enorme de energía. Por ejemplo, la luminosidad estimada para el evento GW150914 es  $L \sim 0.2 \times 10^{-3} L_0$ , en donde la luminosidad de Planck es  $L_0 := c^5/G \sim 10^{59}$  erg/s. En comparación, la luminosidad del sol es de  $L_\odot = 3.839 \times 10^{33}$  erg/s.

La energía de amarre gravitacional newtoniana es  $E = -\frac{1}{2} \frac{GmM}{R}$ , y si tomamos su derivada con respecto al tiempo:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{GmM}{2R^2} \frac{dR}{dt}, \quad (65)$$

conforme el sistema pierde energía por la emisión de ondas gravitacionales, la separación entre los cuerpos disminuye a una tasa de

$$\frac{dR}{dt} = -\frac{64}{5} \frac{G^3}{c^5} \frac{M^3}{R^3}. \quad (66)$$

Como consecuencia de que el radio del sistema binario decrezca, las componentes se mueven más rápido y por lo tanto la frecuencia y amplitud de las ondas gravitacionales emitidas aumenta. A esta etapa se le conoce como señal de *chirp*. La frecuencia orbital aumenta de acuerdo a

$$\frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = \frac{3}{2} \frac{1}{R} \frac{dR}{dt}, \quad (67)$$

y el sistema se fusionará después de un tiempo  $t_{\text{fusion}}$

$$t_{\text{fusion}} = \frac{5}{256} \frac{c^5}{G^3} \frac{R_0^4}{M^5}, \quad (68)$$

en donde  $R_0$  es la separación inicial.

El análisis previo puede generalizarse al caso de órbitas elípticas sin embargo, la emisión de ondas gravitacionales tiende a *circularizar* las órbitas en un tiempo menor al tiempo de fusión[9].

## 7 Conclusiones y perspectivas

Las ondas gravitacionales permitirán en un futuro cercano observar mucho más eventos astrofísicos de los que hemos observado con el espectro electromagnético. Se podrán observar de forma recurrente las fusiones entre agujeros negros y estrellas de neutrones que se encuentran a varios años luz de distancia. Con este tipo de observaciones, podremos ser capaces de determinar el mecanismo de formación de dos agujero negros midiendo de forma precisa su espín y con mayor precisión la masa de los agujero negros progenitores. Aunque LIGO no aún no es capaz de determinar la magnitud del espín de los agujeros negros individuales, nuevas y mejores mediciones serán posibles con detectores más sensibles. Esto también será posible con el desarrollo de herramientas de análisis de datos más sofisticadas.

La astronomía de ondas gravitacionales traerá grandes avances a la astrofísica. Múltiples detecciones ayudarán a determinar la tasa a la cual agujeros negros colisionan y a probar modelos que describen la formación de sistemas binarios. Además, con ayuda de las contrapartes electromagnéticas las ondas gravitacionales servirán para tener un mejor entendimiento de la física de agujeros negros [18].

Las detecciones de LIGO han abierto una nueva era de astronomía de ondas gravitacionales. Con esta nueva ventana, tendremos acceso a la información astrofísica que era invisible en el espectro electromagnético. Que la primera detección de LIGO haya sido de la colisión de dos agujeros negros no sólo muestra la existencia de las ondas sino que pone a los agujeros negros como objetos astrofísicos accesibles para su observación. Sin duda, estamos en la vena de fascinantes descubrimientos.

## Agradecimientos

El autor agradece al Dr. José Recamier por la invitación para participar en la XXV Escuela de Verano en Física y al Instituto de Ciencias Físicas por el apoyo brindado.

## Referencias

- [1] J. C. Degollado, J. Phys. Conf. Ser. **912** (2017) no.1, 012018.
- [2] B. P. Abbott *et al.* [LIGO Scientific and Virgo Collaborations], Phys. Rev. Lett. **116** (2016) no.6, 061102.
- [3] B. P. Abbott *et al.* [LIGO Scientific and Virgo Collaborations], Phys. Rev. Lett. **116** (2016) no.22, 221101.
- [4] Baumgarte, T. W., and Shapiro, S. L., “Numerical Relativity: Solving Einstein’s Equations on the Computer”, Cambridge University Press, (2010). New York, NY, USA.
- [5] B. P. Abbott *et al.* [LIGO Scientific and Virgo Collaborations], Phys. Rev. D **93** (2016) no.12, 122003.

- [6] B. P. Abbott *et al.* [LIGO Scientific and Virgo Collaborations], Phys. Rev. Lett. **116** (2016) no.24, 241103.
- [7] B. P. Abbott *et al.* [LIGO Scientific and VIRGO Collaborations], Phys. Rev. Lett. **118** (2017) no.22, 221101.
- [8] B. P. Abbott *et al.* [LIGO Scientific and Virgo Collaborations], “The basic physics of the binary black hole merger GW150914,” Annalen Phys. (2016) [Annalen Phys. **529** (2017) 0209].
- [9] M. Maggiore, *Gravitational waves. Volume 1: Theory and Experiments*, Oxford, New York (2008).
- [10] C.W. Misner, K.S. Thorne and J.A. Wheeler, *Gravitation*, W.H. Freeman and Company, San Francisco, (1973).
- [11] M. Pitkin, S. Reid, S. Rowan and J. Hough, “Gravitational Wave Detection by Interferometry (Ground and Space),” Living Rev. Rel. **14**, 5 (2011).
- [12] R. M. Wald, *General Relativity*, Chicago Univ. Press (1984).
- [13] B. S. Sathyaprakash and B. F. Schutz, “Physics, Astrophysics and Cosmology with Gravitational Waves,” Living Rev. Rel. **12**, 2 (2009).
- [14] S.L. Shapiro y S.A. Teukolsky *Black Holes, White Dwarfs and Neutron Stars: The Physics of Compact Objects*, John Wiley & Sons, New York, (1983).
- [15] James B. Hartle, *Gravity: An Introduction to Einstein’s General Relativity*, Addison Wesley, 1st Edition (2003) ISBN 0-8053-8662-9.
- [16] J.H. Taylor, *Pulsar timing and relativistic gravity*, *Class. Quantum. Grav.* **10** (1993) S167.
- [17] C.M. Will, “The Confrontation between General Relativity and Experiment,” Living. Rev. Rel. **9** (2006).
- [18] E. Berti *et al.*, *Class. Quant. Grav.* **32**, 243001 (2015)

# Cosmología inflacionaria

G. Germán<sup>1</sup>

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

## 1 Introducción

La forma más común de realizar observaciones cosmológicas es mediante el espectro electromagnético. En orden creciente de energía se dispone de ondas de radio, microondas, infrarrojo, luz visible, ultravioleta, rayos-x y rayos gama. Sin embargo más recientemente se han realizado observaciones utilizando neutrinos (que son partículas que interactúan débilmente) y rayos cósmicos (partículas elementales altamente relativistas). Las observa-

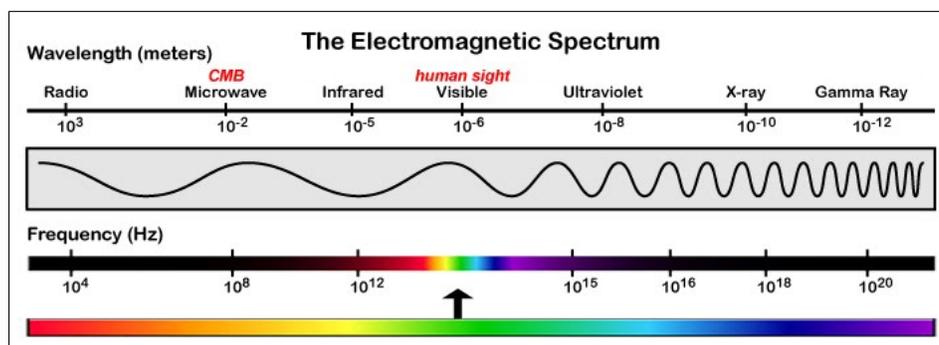


Figure 1: La forma más común de realizar observaciones cosmológicas es mediante el espectro electromagnético.

ciones a muy grandes escalas (a nivel de supercúmulos) apoyan el Principio Cosmológico, que es la proposición de que el universo es homogéneo e isotrópico. Este principio encuentra su expresión matemática a través de la métrica de Friedmann-Lemaitre-Robertson-Walker (FLRW). Otro aspecto de vital importancia al que han llevado las observaciones es el de la expansión del universo. Prácticamente todas las galaxias se están alejando de nosotros, lo cual se expresa mediante el corrimiento al rojo  $z$ . Hubble descubrió también que cuanto más alejada se encuentra una galaxia mayor será su velocidad de recesión. Esta

---

<sup>1</sup>e-mail: gabriel@fis.unam.mx

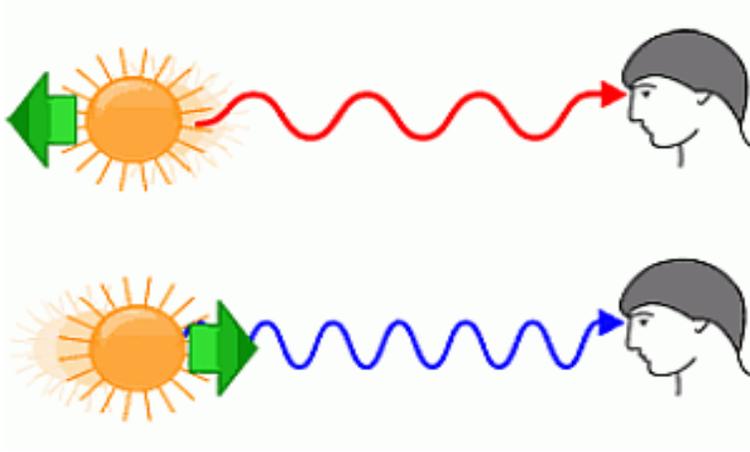


Figure 2: Corrimiento al rojo y al azul

expansión queda establecida mediante la Ley de Hubble. Cabe señalar que esta velocidad se entiende actualmente como la velocidad de expansión del universo, permaneciendo las galaxias en sus mismas posiciones comóviles.

El contenido de materia del universo observado o conjeturado está dado por bariones, radiación, neutrinos, materia oscura y energía oscura.

Las ecuaciones cosmológicas nos permiten describir la evolución del universo. Éstas se siguen de las ecuaciones de la Relatividad General. El Principio Cosmológico para un universo homogéneo e isótropo se implementa matemáticamente a través de la métrica de FLRW. En este caso, el intervalo espacio-temporal está dado por

$$ds^2 = -dt^2 + a(t)^2 \left[ \frac{dr^2}{1 - kr^2} + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2 \right], \quad (1)$$

en donde  $a(t)$  es una función del tiempo que se conoce como factor de escala del universo. Su evolución nos da una medida de la expansión de éste. En la Ec.(1) arriba,  $k$  es una constante relacionada con la curvatura del espacio-tiempo. Las ecuaciones de Einstein son ecuaciones entre componentes de tensores que relacionan la distribución de energía-momento de la materia con la geometría del espacio-tiempo

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R = 8\pi GT_{\mu\nu} + \Lambda g_{\mu\nu}. \quad (2)$$

La ecuación de estado establece una relación entre la presión y la densidad de energía  $p = p(\rho) = w\rho$ . El tensor de energía momento para un fluido perfecto está dado por

$$T_{\mu\nu} = \text{diag}(\rho, -p, -p, -p). \quad (3)$$

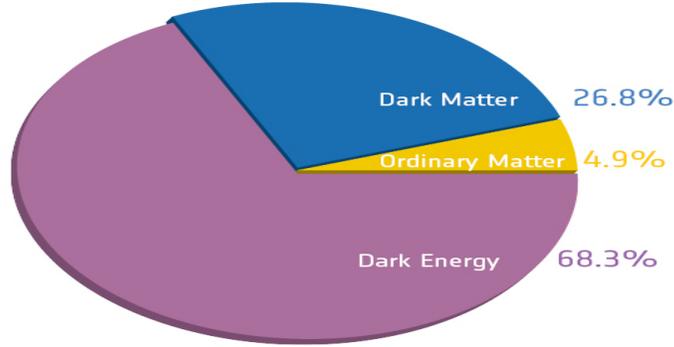


Figure 3: Contenido de materia del universo

Definiendo  $H$  como la función de Hubble

$$H \equiv \frac{\dot{a}(t)}{a(t)}, \quad (4)$$

tenemos que para  $g_{\mu\nu}$  y  $T_{\mu\nu}$  dados arriba de las ecuaciones de Einstein se siguen las ecuaciones de Friedmann

$$H^2 = \frac{8\pi G}{3} \rho + \frac{k}{a^2}, \quad (5)$$

$$\frac{\ddot{a}}{a} = -\frac{4\pi G}{3}(\rho + 3p), \quad (6)$$

de éstas se sigue la ecuación de continuidad o de conservación de la energía

$$\dot{\rho} = -3H(\rho + p). \quad (7)$$

La cosmología estándar está apoyada por al menos tres tipos de observaciones: la expansión (de Hubble) del universo, la radiación cósmica de microondas de fondo de  $2.725K$  y la abundancia cósmica de elementos ligeros (Hidrógeno, Helio, y Deuterio en particular).

## 2 Características del universo

La curvatura del universo queda determinada por la constante  $k$  que aparece en la ecuación (1). Si  $k = 0$ , el universo es plano. En tanto que si  $k > 0$  o  $k < 0$  el universo es esférico o

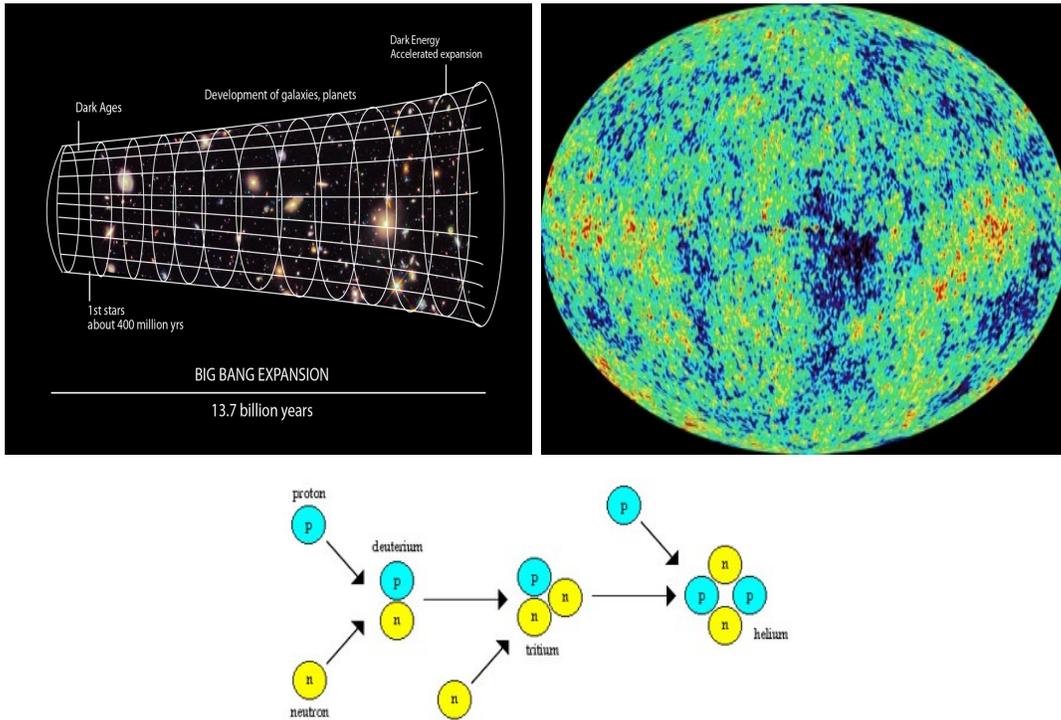


Figure 4: La cosmología estándar está apoyada por al menos tres tipos de observaciones: la expansión (de Hubble) del universo, la radiación cósmica de microondas de fondo de  $2.725K$  y la abundancia cósmica de elementos ligeros.

hiperbólico, respectivamente. Observaciones recientes sugieren que el universo es plano o muy próximo a plano. Resolviendo las ecuaciones de Friedmann y de fluidos junto con la ecuación de estado  $p = \omega\rho$ , se siguen las soluciones para universos dominados por:

Materia:  $\omega = 0$ ,  $\rho \sim a^{-3}$ ,  $a(t) \sim t^{2/3}$ ,  $H = 2/3t$ .

Radiación:  $\omega = 1/3$ ,  $\rho \sim a^{-4}$ ,  $a(t) \sim t^{1/2}$ ,  $H = 1/2t$ .

Energía de vacío:  $\omega = -1$ ,  $\rho \sim \Lambda = \text{constante}$ ,  $a(t) \sim e^{Ht}$ ,  $H = \text{cte}$ .

Mezclas:  $\rho = \rho_{mat} + \rho_{rad} + \rho_{\Lambda} + \dots$

Lo anterior se modifica en el caso de curvatura distinta de cero. Usualmente la forma de proceder en los problemas sencillos es especificando el tipo de fluido que se estudia mediante su ecuación de estado  $p = \omega\rho$ . Posteriormente se resuelve la ecuación del fluido obteniéndose la densidad  $\rho$  como función del factor de escala y finalmente de la ecuación de Friedmann se sigue la evolución temporal del factor de escala  $a(t)$ . En el caso de un parámetro de estado  $\omega$  constante, las ecuaciones se pueden resolver en forma general. Para mezclas cada fluido obedecerá su propia ecuación de evolución sin embargo, en cualquier

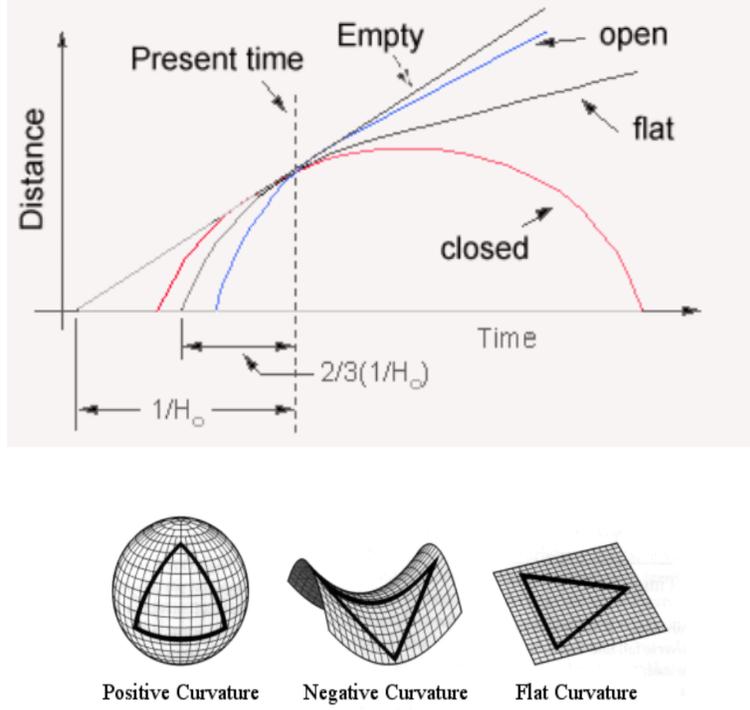


Figure 5: En la ecuación (3), la constante  $k$  determina la curvatura del universo. Si  $k = 0$ , el universo es plano. En tanto que si  $k > 0$  o  $k < 0$  el universo es esférico o hiperbólico, respectivamente. Observaciones recientes sugieren que el universo es plano o muy próximo a plano.

caso, sólo habrá una ecuación de Friedmann. Los principales parámetros que describen la dinámica global del universo son la razón de expansión actual del universo  $H_0$ , los parámetros de densidad de energía  $\Omega_i$  y el parámetro de desaceleración  $q_0$ . Consideremos ahora la edad del universo asociada con el parámetro de Hubble  $H_0$ . De la ley de Hubble

$$\vec{v} = H_0 \vec{r}, \quad (8)$$

podemos ver fácilmente que  $H_0^{-1}$  tiene unidades de tiempo. Para un universo vacío  $H_0 = 100h \frac{Km}{segMpc}$  implica

$$H_0^{-1} = 9.77h^{-1} \times 10^9 \text{ años}, \quad (9)$$

donde, de acuerdo a las más recientes observaciones  $H_0 = 67.74 \pm 0.46$ . A  $H_0^{-1}$  se le conoce como el tiempo de Hubble.

Para un universo plano dominado por materia la edad del universo se ve reducida con

respecto al tiempo de Hubble dado que  $a \sim t^{2/3} \Rightarrow H = 2/3t \Rightarrow t_0 = (2/3)H_0^{-1}$ . Para un universo abierto la edad aumentaría. Esto se entiende por el hecho de que en un universo con menos materia, toma más tiempo para que la atracción gravitacional detenga la expansión a la razón de expansión actual. Las observaciones sugieren que una mejor opción para un universo de baja densidad es mantener la geometría plana introduciendo una constante cosmológica ( $\rho_\Lambda$  se opone a la desaceleración). Los valores preferidos son  $\Omega_{mat} \sim 0.3, h \sim 0.67, \Rightarrow \Omega_\Lambda \sim 0.7, t \sim 13.7 \times 10^9$  años.

La densidad crítica se define como aquella requerida para hacer plana la geometría del universo y se denota  $\rho_c$ , queda definida por

$$\rho_c = 1.88h^2 \times 10^{-26} \frac{Kg}{m^3} = 2.78h^{-1} \times 10^{11} \frac{M_{sol}}{(h^{-1}Mpc)^3}, \quad (10)$$

donde  $M_{sol}$  denota una masa igual a la del sol. Una galaxia tiene masa  $\sim 10^{11}M_{sol}$ . Las galaxias típicamente están separadas  $1Mpc \Rightarrow \rho_{universo} \sim \rho_c \Rightarrow \Omega \equiv \rho/\rho_c \sim 1$ .

La materia en las estrellas contribuye con  $\Omega_{estr} \sim 0.005 \rightarrow 0.01$ . No todo el material que podemos ver está en la forma de estrellas (gas, enanas oscuras  $m \leq 0.08M_{sol}$ ). Nucleosíntesis implica la abundancia observada de elementos si  $0.016 \leq \Omega_b h^2 \leq 0.024$ . La curva de rotación de galaxias requiere un halo con  $\Omega_{halo} \sim 0.1$ .

Así mismo la gravitación entre cúmulos de galaxias  $\rightarrow \Omega_b \sim 0.35$ , en tanto que por el movimiento peculiar de las galaxias se infiere  $\Omega_b \geq 0.2$ . Observaciones recientes apoyan una densidad total  $\Omega_0 = 1$ . Todas estas son evidencias de que la materia bariónica conocida no puede explicar los diversos fenómenos observados y que claramente es necesaria la presencia de la materia oscura.

Propiedades de la radiación de fondo:  $T = 2.725 \pm 0.001K$ , radiación de cuerpo negro  $\epsilon_{rad} = \rho_{rad}c^2 = \alpha T^4 \Rightarrow \Omega_{rad} = 2.47 \times 10^{-5}h^{-2}$ . Una propiedad importante se sigue de  $\rho_{rad} \sim 1/a^4 \sim T^4 \Rightarrow T \sim 1/a$ . Conforme el universo se expande y se enfría la distribución de radiación continúa correspondiendo a una distribución térmica de cuerpo negro.

El origen de la radiación de fondo se encuentra en la formación de sistemas neutros (átomos de hidrógeno) con la consecuente liberación de fotones a una temperatura  $T_{dec} \sim 3000K$  conocida como época de recombinación o desacoplamiento. Esto ocurre en la superficie de última dispersión.

Consideremos la historia térmica del universo: la contribución a  $\Omega_0$  de neutrinos está dada por  $\Omega_\nu \sim 1.68 \times 10^{-5}h^{-2}$ . De manera que la contribución de partículas relativistas (neutrinos más fotones) es  $\Omega_{rel} = \Omega_\gamma + \Omega_\nu \sim 4.15 \times 10^{-5}h^{-2} \Rightarrow$  la mayor parte de la materia del universo actual no es relativista.

$$\frac{\Omega_{rel}}{\Omega_{mat}} = \frac{4.15 \times 10^{-5}}{\Omega_0 h^2} \frac{1}{a} \quad (11)$$

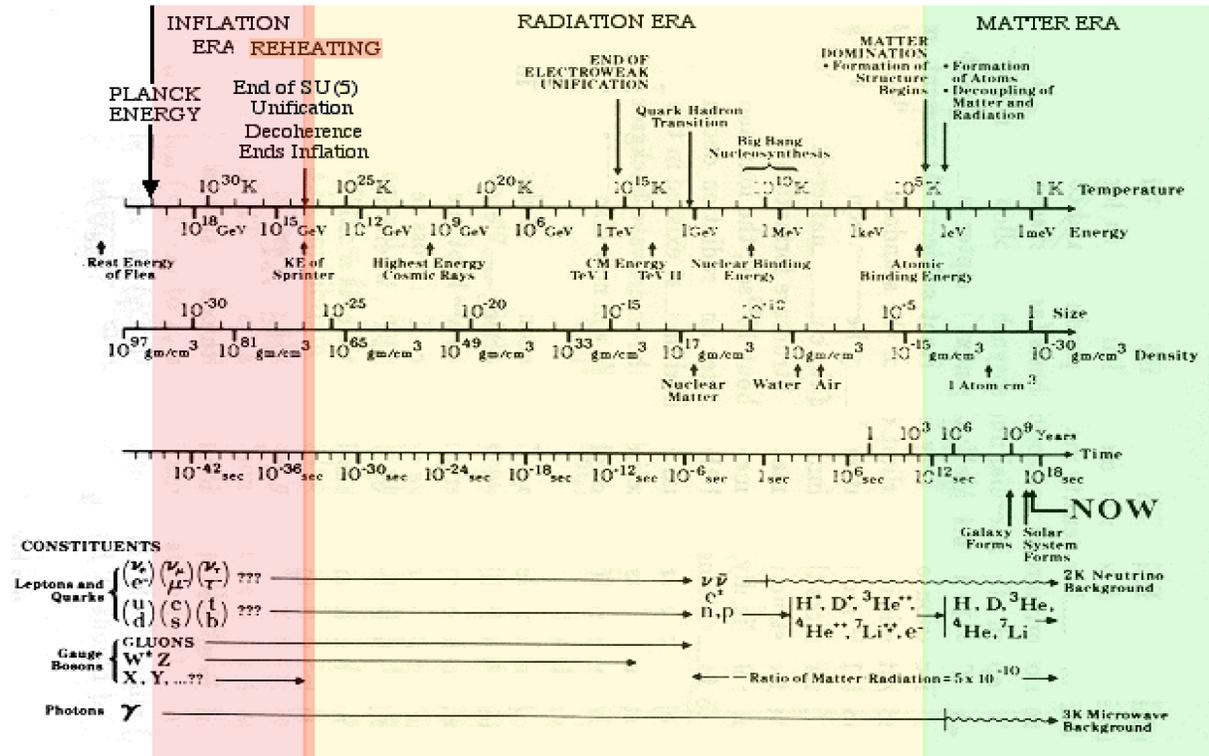


Figure 6: Historia térmica del universo

En la época de desacoplamiento  $a_{dec} \sim 1/1000 \Rightarrow \Omega_{rel} < \Omega_{mat}$ . De manera que durante desacoplamiento el universo estaba dominado por la materia no-relativista.

Para  $\Omega_{rel} = \Omega_{mat} \Rightarrow a \equiv a_{eq} = 1/24000\Omega_0 h^2$  se da la época de igualdad de materia y radiación. Esto ocurre para  $t_{eq} \sim 3400\Omega_0^{-3/2} h^{-3}$  años  $\approx 10,000$  años, a una temperatura  $T \sim 66,000\Omega_0 h^2 K$ . Por otro lado nucleosíntesis ocurre para  $t \sim 1seg, T_{nucl} \sim 0.1Mev$ .

Nucleosíntesis estudia el origen de los elementos ligeros, ésta ocurre aproximadamente cuando  $t \sim 1seg, T_{nucl} \sim 0.1Mev$  y el número de neutrones a protones es  $N_n/N_p \sim 1/8$ .

La fracción de masa total en helio-4:  $Y \equiv 2N_n/(N_n + N_p) \sim 0.22 \Rightarrow 22$  por ciento de la materia del universo está en la forma de  $H_4$ , con hidrógeno  $\sim 75$  por ciento, deuterio  $10^{-4}$ ,  $H_3 \sim 10^{-5}$ , litio-7  $\sim 10^{-10}$ .

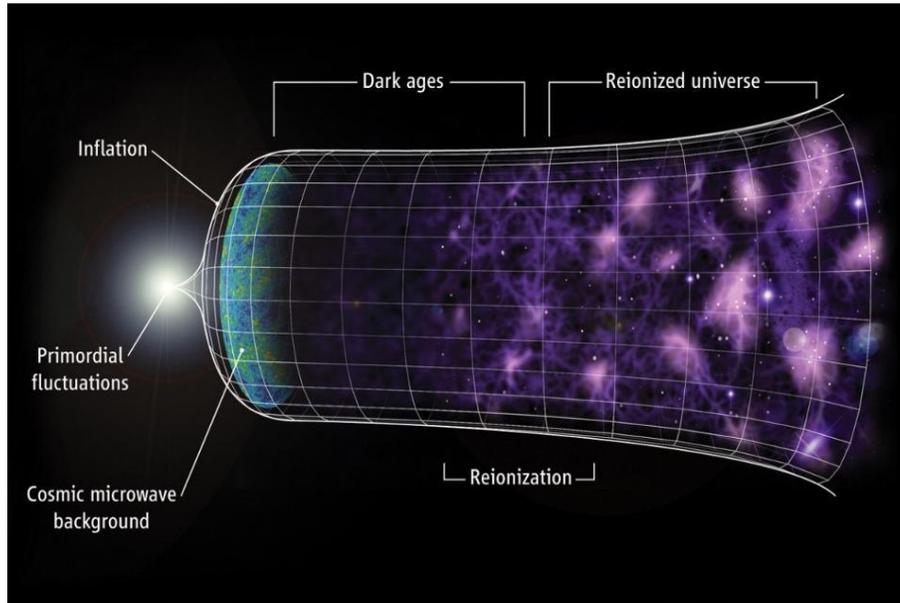


Figure 7: El universo inflacionario

### 3 El universo inflacionario

La cosmología de la gran explosión o "Hot Big-Bang" (HBB) no está exenta de problemas principalmente relacionados con condiciones iniciales o cuando se le considera en el contexto de teorías de gran unificación. Así, por ejemplo, tenemos el problema del universo plano. Esto es, dado que  $|\Omega_{tot}(t) - 1| = |k|/a^2 H^2$ , para un universo dominado por radiación  $a^2 H^2 \sim t^{-1}$  y por tanto  $|\Omega - 1| \sim t$  en tanto que para uno dominado por materia  $a^2 H^2 \sim t^{-2/3}$  y por tanto  $|\Omega - 1| \sim t^{2/3} \Rightarrow |\Omega - 1|$  es una función creciente del tiempo!  $\Rightarrow$  la geometría plana es una situación inestable para el universo. En otras palabras, cómo un universo que se ha estado desviando de un universo plano a lo largo de miles de millones de años se encuentra ahora tan aproximadamente plano? O equivalentemente, por qué se encuentra tan cerca de la densidad crítica?

Otro problema de interés es el del horizonte: cómo entendemos que regiones causalmente desconectadas de acuerdo a la cosmología del big-bang tienen sin embargo muy aproximadamente la misma temperatura? Esto se infiere de las mediciones de la radiación de fondo.

Teorías de gran unificación en conjunción con cosmología predicen la existencia de abundantes defectos topológicos (monopolos magnéticos, cuerdas cósmicas, etc) que sin embargo no se observan. Más importante es el hecho de que en la cosmología del big-bang

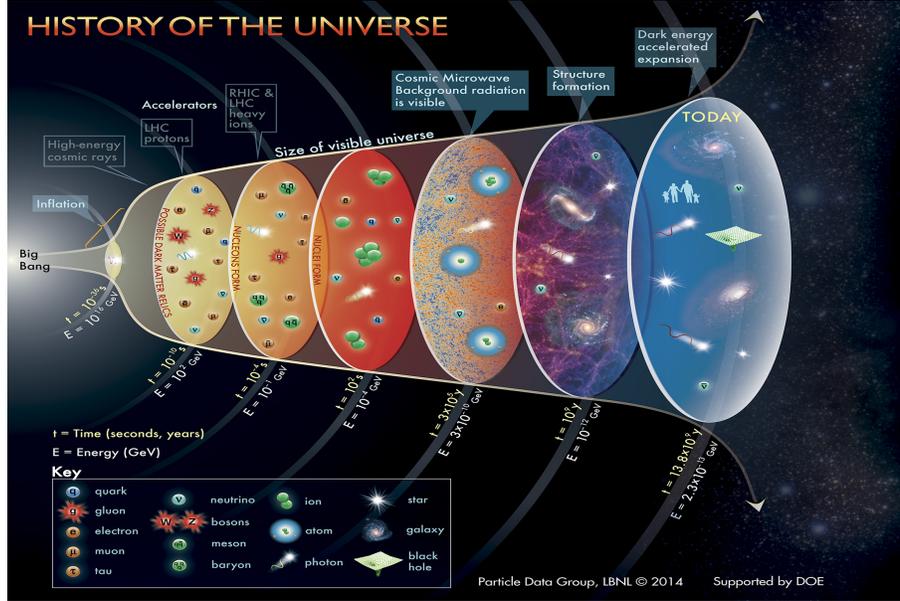


Figure 8: Historia del universo.

las condiciones iniciales necesarias para la formación de estructura observada (cúmulos de galaxias y supercúmulos) se introducen "a mano" y no son obtenidas de la teoría. Inflación ofrece una explicación plausible para la resolución de todos los problemas mencionados arriba. En su forma más general inflación se define como una época de expansión del universo en que el factor de escala de éste crece en forma acelerada, esto es

$$\ddot{a} > 0, \quad (12)$$

$$\frac{\ddot{a}}{a} = -\frac{4\pi G}{3}(\rho + 3p), \quad p < -\frac{\rho}{3} \Rightarrow \ddot{a} > 0. \quad (13)$$

Por ejemplo, para una constante cosmológica la ecuación de estado es  $p = -\rho$ . Según la ecuación de Friedmann

$$H^2 = \frac{8\pi G}{3} - \frac{k}{a^2} + \frac{\Lambda}{3}, \quad (14)$$

después de un tiempo  $\Lambda$  domina  $\Rightarrow H^2 \sim \frac{\Lambda}{3} \Rightarrow a(t) = e^{\sqrt{\frac{\Lambda}{3}}t}$ , resolviendo los problemas de la vieja cosmología. El problema importante de la formación de estructura se entiende ahora como debido originalmente a las fluctuaciones de un campo escalar. Inflación usualmente se implementa con el auxilio de la física de partículas elementales. En los modelos de partículas existen campos escalares. Un campo escalar, a través de su energía potencial, puede dar lugar a una época inflacionaria. Este campo escalar está

(como cualquier otro) sujeto a fluctuaciones cuánticas las cuales son amplificadas hasta escalas macroscópicas por el proceso inflacionario. La evolución de estas fluctuaciones estudiadas por las ecuaciones linealizadas de Einstein son las que eventualmente darán lugar (por inestabilidad gravitacional) a la formación de la estructura conocida.

Más específicamente consideremos el lagrangiano para un campo escalar  $\phi$

$$L = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - V(\phi), \quad (15)$$

donde  $V(\phi)$  es el potencial que en la aproximación de rodamiento lento domina sobre las otras formas de energía, en particular  $V(\phi) \gg \frac{1}{2} \dot{\phi}^2$ . De aquí se siguen los parámetros de rodamiento lento

$$\epsilon \equiv \frac{M^2}{2} \left( \frac{V'}{V} \right)^2, \quad \eta \equiv M^2 \frac{V''}{V}, \quad \xi \equiv M^4 \frac{V'V'''}{V^2}, \quad (16)$$

donde  $M$  es la escala reducida de Planck,  $M = 2.44 \times 10^{18}$  GeV. Las observables están dadas en términos de los parámetros de rodamiento lento como sigue

$$n_t = -2\epsilon = -\frac{r}{8}, \quad (17)$$

$$n_s = 1 + 2\eta - 6\epsilon, \quad (18)$$

$$n_{sk} = \frac{dn_s}{d \ln k} = 16\epsilon\eta - 24\epsilon^2 - 2\xi_2, \quad (19)$$

$$n_{skk} = \frac{d^2 n_s}{d \ln k^2} = -192\epsilon^3 + 192\epsilon^2\eta - 32\epsilon\eta^2 - 24\epsilon\xi_2 + 2\eta\xi_2 + 2\xi_3, \quad (20)$$

$$\mathcal{P}_s(k) = \frac{1}{24\pi^2} \frac{V}{\epsilon} = A_s \left( \frac{k}{k_H} \right)^{n_s - 1}. \quad (21)$$

Aquí  $n_{sk}$  denota el gradiente del índice espectral  $n_s$  y  $n_{skk}$  el gradiente del gradiente, en una notación que se explica sola. Todas las cantidades con un subíndice  $H$  son evaluadas en la escala  $\phi_H$ , en la cual las perturbaciones observables son producidas, aproximadamente 50 – 60 e-folds antes del fin de inflación. El espectro de perturbaciones con número de onda  $k$  es  $\mathcal{P}_s(k)$  con una amplitud al cruce del horizonte dada por  $\mathcal{P}_s(k_H) \approx 2.2 \times 10^{-9}$ , la escala de inflación es  $\Delta$  con  $\Delta \equiv V_H^{1/4}$ . El espectro de potencia tensorial parametrizado a primer orden por los parámetros de rodamiento lento es

$$\mathcal{P}_t(k) = A_t \left( \frac{k}{k_H} \right)^{n_t}, \quad (22)$$

éste permite definir la razón tensorial a escalar como  $r \equiv \mathcal{P}_t(k)/\mathcal{P}_s(k)$ .

A manera de ejemplo se revisan brevemente algunos aspectos de *Inflación Natural*, que es particularmente interesante porque puede ser entendido como un modelo para campos grandes o pequeños y porque tiene un sólido origen físico basado en una simetría aproximada de Goldstone. El potencial está dado por

$$V = V_0 \left( 1 + \cos \left( \frac{\phi}{f} \right) \right). \quad (23)$$

Enseguida se define la cantidad  $\delta_{\text{ns}}$  como una medida de la desviación de invariancia de

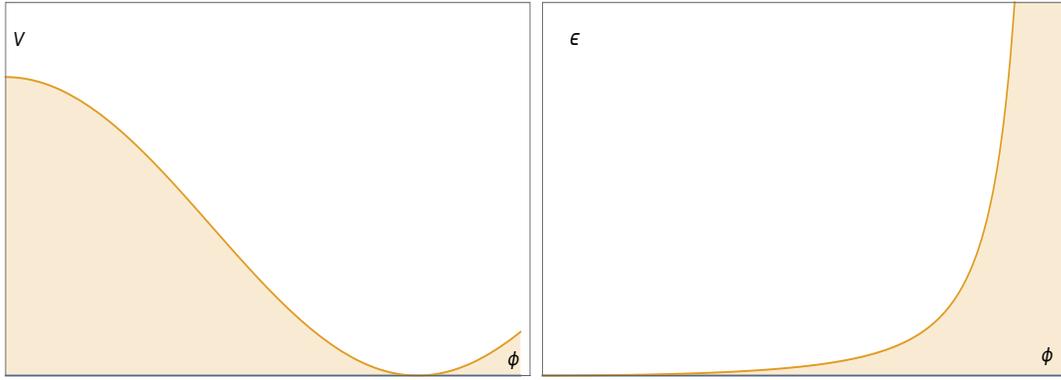


Figure 9: El potencial de *Inflación Natural* con su correspondiente índice tensorial  $\epsilon$ . En IN el fin de la inflación está dado por la saturación de la condición  $\epsilon = 1$ , con el inflatón no sólo produciendo inflación sino también terminándola.

escala cuando las perturbaciones relevantes dejan el horizonte

$$\delta_{\text{ns}} \equiv 1 - n_s. \quad (24)$$

Se puede tomar la expresión para el índice espectral Ec.(18) como una ecuación para  $\phi_{\text{H}}$  con un valor predeterminado de  $n_s$ . Para el potencial de arriba la solución a esta ecuación es

$$\phi_{\text{H}} = f \cos^{-1} \left( \frac{3 - f^2 \delta_{\text{ns}}}{1 + f^2 \delta_{\text{ns}}} \right), \quad (25)$$

o, equivalentemente

$$c_{\text{H}} = \frac{3 - f^2 \delta_{\text{ns}}}{1 + f^2 \delta_{\text{ns}}}, \quad (26)$$

donde, en notación obvia,  $c_{\text{H}} \equiv \cos \left( \frac{\phi_{\text{H}}}{f} \right)$ .

Los parámetros de rodamiento lento están dados por

$$\epsilon = \frac{1}{4} \left( \delta_{\text{ns}} - \frac{1}{f^2} \right), \quad (27)$$

$$\eta = \frac{1}{4} \left( \delta_{\text{ns}} - \frac{3}{f^2} \right) = \epsilon - \frac{1}{2f^2}, \quad (28)$$

$$\xi = -\frac{1}{2f^2} \left( \delta_{\text{ns}} - \frac{1}{f^2} \right) = -\frac{2}{f^2} \epsilon, \quad (29)$$

de la Ec.(28) se ve que en *Inflación Natural*, inflación es siempre terminada por el parámetro  $\epsilon$  cuando  $\epsilon = 1$  ya que entonces la condición de rodamiento lento deja de satisfacerse. Las observables son

$$r = 4 \left( \delta_{\text{ns}} - \frac{1}{f^2} \right), \quad (30)$$

$$n_{sk} = -\frac{1}{2} \left( \delta_{\text{ns}}^2 - \frac{1}{f^4} \right). \quad (31)$$

De la Ec.(31) se tiene que  $n_{sk}$  es siempre negativo. Usando esta ecuación también es posible encontrar una cota para  $r$ . Esta cota, sin embargo, es más débil que la que se dará abajo. De la positividad de  $r$  se ve que  $\delta_{\text{ns}} > 0$ . Esto significa que el índice espectral debe ser menor que uno. Se encuentran entonces las siguientes situaciones límites dependiendo del parámetro  $f$

$$\frac{1}{\sqrt{\delta_{\text{ns}}}} < f < \infty, \quad (32)$$

$$0 < r < 4\delta_{\text{ns}}, \quad (33)$$

$$-\frac{1}{2}\delta_{\text{ns}}^2 < n_{sk} < 0. \quad (34)$$

De acuerdo a los posibles valores de el índice espectral reportado por el satélite Planck 2015,  $n_s \simeq 0.965$  (correspondiente a  $\delta_{\text{ns}} \simeq 0.035$ ) se sigue de la Ec.(31), o Ec.(34) que  $|n_r|$  es al menos dos órdenes de magnitud más pequeño que  $r_{\text{H}}$ . Más importante, se encuentra que  $f > 5$  en unidades de Planck. Dado que  $f$  es la escala de rompimiento de simetría es quizá insatisfactorio que deba ser más grande que la escala de Planck. Esta característica de *Inflación Natural* así como el hecho de que se ha *supuesto* que inflación termina debido al gradiente del potencial anterior lleva a considerar un modelo más natural en donde inflación termina mucho antes debido a un segundo campo híbrido. La introducción de inflación híbrida en este contexto permite tener una escala de rompimiento de simetría  $f$  más baja que la escala de Planck, de hecho permite escalas muy bajas.

## Referencias

1. An Introduction to Modern Cosmology, A. Liddle, 3rd Edition., John Wiley and Sons, 2015.
2. Physical Foundations of Cosmology, V. Mukhanov, Cambridge University Press, 2005.
3. Relativistic Cosmology, G.F.R. Ellis, R. Maartens and M. A. H. MacCallum, Cambridge University Press, 2012.
4. Introduction to Cosmology, M. Roos, 3rd Edition., John Wiley and Sons Ltd, 2003.
5. Modern Cosmology, S. Dodelson, Academic Press, 2003.
6. The Early Universe, E.W. Kolb and M.S. Turner, Addison-Wesley, Redwood City, 1994.
7. <https://www.cosmos.esa.int/web/planck>
8. K. Freese, J. A. Frieman and A. V. Olinto, *Natural inflation with pseudo - Nambu-Goldstone bosons*, Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 3233, doi:10.1103/PhysRevLett.65.3233.
9. G. G. Ross, G. Germán and J. A. Vazquez, *Hybrid Natural Inflation*, JHEP **1605** (2016) 010, doi:10.1007/JHEP05(2016)010 [arXiv:1601.03221 [astro-ph.CO]].

## RESUMEN DE LA CHARLA:

### “LA OBSERVACIÓN DEL UNIVERSO EXTREMO CON HAWC”

Adiv González Muñoz,  
IFUNAM

En esta charla se dio un panorama general de las principales técnicas para la detección de rayos gamma de muy alta energía con instrumentos en Tierra. Se consideran de “muy alta energía” aquellos rayos gamma con energías superiores a los 100 GeV. Estos rayos gamma sólo puede ser producidos en los ambientes más energéticos y violentos del Universo, como por ejemplo las remanentes de supernovas, las galaxias con núcleos activos, sistemas binarios y los destellos de rayos gamma. Los rayos gamma que vienen de estos objetos astrofísicos, al interactuar con la atmósfera terrestre producen una cascada de partículas secundarias las cuales viajan a través de la atmósfera a velocidades relativistas, es decir, a velocidades muy cercanas a la velocidad de la luz en el vacío.

Dado que la luz en un medio viaja más lento, las partículas relativistas pueden producir luz Cherenkov en ese medio. Así, las dos principales técnicas para observar rayos gamma de muy alta energía mediante las cascadas atmosféricas se van a centrar en detectar la luz Cherenkov producida directamente en la atmósfera, o en contenedores de agua. A los instrumentos que utilizan la primera técnica se les denomina IACTs, por sus siglas en inglés de Telescopios de Imagen de Cherenkov Atmosférico. Su diseño básico consiste de grandes reflectores parabólicos con los que concentran la luz Cherenkov en cámaras compuestas de cientos de pequeños tubos foto-multiplicadores, con el cual forman la “imagen” de la cascada atmosférica. Con el tamaño, forma e intensidad de luz de la imagen obtenida se puede estimar la dirección y la energía de rayo gamma original. Ejemplos de este tipo de instrumentos son los telescopios MAGIC, en las Islas Canarias, H.E.S.S., en Namibia, y VERITAS, en E.U.A. La segunda técnica consiste en tener grandes contenedores de agua totalmente aislados de luz externa, cubriendo un área extensa.

El observatorio HAWC (High Altitude Water Cherenkov observatory) es actualmente el único ejemplo en el mundo de este tipo de instrumento, el cual está instalado en el Parque Nacional Pico de Orizaba, en México, a una altura de 4100 m sobre el nivel del mar. El observatorio consiste de 300 grandes tanques de más de 7 metros de diámetro y 5 metros de alto, capaces de contener hasta 200 mil litros de agua, dando un total de 60 millones de litros. Cada uno de estos tanques está equipado con 4 tubos foto-multiplicadores para capturar la luz Cherenkov producida en el agua. Así, registrando el tiempo de llegada y la cantidad de luz en cada uno de los tanques se puede reconstruir la forma de la cascada y con esto estimar la dirección y energía del rayo gamma original. Una de las principales ventajas de la técnica de Cherenkov en agua es que el observatorio puede operar independientemente de las condiciones atmosférica ya sea de día o de noche, a diferencia de los IACTs que necesitan noches claras y oscuras para poder operar, además de tener un campo de visión amplio, recolectado el flujo de rayos gamma de varias fuentes al mismo tiempo. Gracias a estas capacidades es que HAWC ya ha publicado un catálogo de fuentes de rayos gamma de muy alta energía en donde además de detectar fuentes ya conocidas, ha podido identificar nuevas fuentes. Su capacidad de operación casi continua hace el observatorio HAWC un instrumento ideal para el monitoreo de fuentes intensas de rayos gamma, de las cuales destacan las galaxias con núcleos activos Markarian 421 y 501 y la nebulosa del Cangrejo. Así, HAWC también ha publicado un estudio del monitoreo de estas fuentes reafirmando lo ya observado por otros instrumentos, que las fuentes Markarian 421 y 501 son altamente variables y que la nebulosa del Cangrejo es una fuente muy estable de rayos gamma de muy alta energía. Actualmente el observatorio HAWC está en proceso de expansión con la instalación de 350 tinacos de tamaño doméstico adicionales al arreglo principal de 300 tanques. Esta expansión servirá para mejorar la sensibilidad del observatorio.

Las publicaciones del observatorio HAWC se puede consultar aquí:  
<https://www.hawc-observatory.org/publications/>

# Invitación a las Perturbaciones Cosmológicas

Juan Carlos Hidalgo<sup>1, \*</sup>

<sup>1</sup> *Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, Morelos, 62210, México* (Dated: February 11, 2018)

## I. DESCRIPCIÓN PROMEDIO DEL UNIVERSO

El principio cosmológico consiste en la idea de que la descripción de nuestro Universo no existen posiciones especiales en el espaciotiempo (propiedad de homogeneidad) y que la dinámica del universo es equivalente en cualquier dirección de observación o movimiento (principio de isotropía). Estas propiedades delimitan la descripción matemática de nuestro Universo como un todo y, en Relatividad General, se restringen a ser descrita por la métrica de Friedmann-Lemaître-Robertson-Walker (FLRW):

$$ds^2 = -dt^2 + a^2(t) \left[ \frac{dr^2}{1 - Kr^2} + r^2 d\Omega^2 \right], \quad (1)$$

donde el elemento de ángulo sólido es  $d\Omega$  y el único parámetro dinámico es el factor de escala  $a(t)$ . La curvatura espacial  $K$  puede describir a una sección espacial esférica ( $K > 0$ ), hiperbólica ( $K < 0$ ) o plana ( $K = 0$ ).

Para la descripción FLRW, la expansión (o contracción) está implícita en el incremento (o reducción) del factor de escala. El radio o distancia física entre dos galaxias del universo FLRW está dado por

$$\mathbf{R}(t, \mathbf{r}) = a(t)\mathbf{r}, \quad (2)$$

y esta distancia evoluciona a partir de la ley de Hubble: La velocidad de recesión es proporcional a la distancia de la galaxia observada desde un observador cualquiera. Es decir

$$\mathbf{v} = H\mathbf{r}. \quad (3)$$

Esta ley fue confirmada observacionalmente por Edwin Hubble en 1929. El factor de Hubble  $H = d \ln(a)/dt$  es el único valor propio del tensor de deformación (derivada de la velocidad) y dicha ley continúa siendo verificada a nivel local.

La dinámica del factor de escala está regida por la curvatura espacial y por el contenido de materia del universo. De acuerdo con las ecuaciones de Einstein, la evolución de la métrica está dictada por dos ecuaciones en el caso de un universo isotrópico y homogéneo. De ellas, la primera se conoce como ecuación de Friedmann

$$H^2 + \frac{k c^2}{a(t)^2} = \frac{8\pi G}{3} \bar{\rho} + \frac{1}{3} \Lambda, \quad (4)$$

donde se incluye a la constante cosmológica  $\Lambda$ , estipulada en las ecuaciones de Einstein. Una segunda ecuación de Friedmann, complementa la descripción del factor de escala y se deduce de la traza de las componentes  $ij$

---

\* Correo electrónico: hidalgo@icf.unam.mx

de las ecuaciones de Einstein.

$$2\frac{1}{a}\frac{d^2a}{dt^2} + H^2 + \frac{kc^2}{a^2} = -\frac{8\pi Gp}{c^2}. \quad (5)$$

En un universo FLRW, las componentes materiales son igualmente homogéneas e isotrópicas, de modo que la densidad de energía y la presión cumplen que

$$\rho = \bar{\rho}(t) \quad \text{y} \quad p = \bar{p}(t). \quad (6)$$

donde la barra indica una cantidad homogénea (sin dependencia espacial). En el caso más simple de un universo sin curvatura, y dominado por materia con ecuación de estado  $\bar{p}/\bar{\rho} = w$ , la solución a estas ecuaciones indica que

$$a(t) = \left(\frac{t}{t_0}\right)^{2/3(w+1)}, \quad (7)$$

donde la normalización del factor de escala adimensional se toma al tiempo presente  $t_0$ .

La descripción del universo como un espaciotiempo homogéneo e isotrópico es de mucha ayuda para caracterizar las propiedades generales y las componentes dominantes del mismo a distintas épocas. Por ejemplo, la medición de distancia a objetos de luminosidad intrínseca conocida (Supernovas tipo Ia), nos da una idea de las características que debe cumplir la constante cosmológica, o su contraparte material, la energía oscura.

Sin embargo, las componentes observadas en el universo, y aún las inferidas como la materia oscura, no se presentan de manera homogénea en escalas menores a 300 Megaparsecs, y por el contrario, la mayor parte de la materia está acumulada en galaxias y sus conglomerados, grupos y cúmulos de galaxias, que limitan la validez de la descripción homogénea.

## II. MÁS ALLÁ DE LA DESCRIPCIÓN PROMEDIO

Las inhomogeneidades en el universo son evidentes desde que se identifican las distancias a las galaxias y sus conglomerados en nuestra vecindad. Quizás la única componente totalmente homogénea, que no presenta propiedades de aglutinamiento, sea la energía oscura. En el estudio de su naturaleza caben las descripciones de componentes sin inhomogeneidades, aunque esto representa al conjunto de modelos más simples. Excluyendo a la energía oscura, las componentes aglutinantes son las que buscamos estudiar para entender la naturaleza de las galaxias y sus conglomerados, elementos que en su conjunto constituyen la estructura a gran escala del universo (LSS por sus siglas en inglés).

Una primer aproximación a la descripción de inhomogeneidades en el campo de la densidad de energía es la perturbación de densidad denotado por  $\delta\rho(r, t)$ . La cantidad más útil en esta descripción es el contraste de densidad dado por

$$\delta = \delta\rho(r, t)/\bar{\rho}(t) = [\rho(r, t) - \bar{\rho}(t)]/\bar{\rho}(t). \quad (8)$$

Para darnos una idea del valor del contraste de densidad en distintos objetos astrofísicos, la densidad promedio necesaria para que el universo sea plano, llamada densidad crítica, es de 0.2 átomos por metro cúbico o  $\bar{\rho}(t_0) \approx 10^{27} \text{ kg/m}^3$ . Por otro lado, la masa de la galaxia, del orden de  $10^{12} M_\odot$  y con un diámetro  $\approx 55$  kiloparsec, nos indican que su densidad es del orden de  $2 \times 10^{-22} \text{ kg/m}^3$ . Con esto, el contraste de densidad en la galaxia

es de orden

$$\delta_{\text{gal}} \approx 10^5. \quad (9)$$

Con tal magnitud, es imposible describir el estado actual de galaxias individuales en términos de perturbaciones, válidas sólo mientras  $\delta < 1$ . Sin embargo, los sistemas con cada vez mayor masa (grupos y cúmulos de galaxias) resultan en densidades menores y por tanto pueden describirse hasta cierto tiempo en su evolución por perturbaciones de densidad. Esto nos indica una formación de estructura jerárquica, donde en un principio no existían estructuras como tal. Las galaxias y sus conglomerados tienen su origen en la acumulación de materia en pequeños pozos de potencial, o inhomogeneidades métricas que se describen en un régimen perturbativo de origen.

Un modelo simple e ilustrativo para considerar inhomogeneidades es el colapso esférico tipo "Top Hat" [4, 5], donde se considera una región central de sobredensidad uniforme, y un fondo cosmológico que presenta la densidad homogénea del universo. Ambas regiones se empatan a un radio finito  $r = r_{\text{in}}$  que denota el tamaño de la inhomogeneidad. Matemáticamente, se supone una región geoméricamente equivalente a una 3-esfera (la sobredensidad), con densidad  $\rho_{\text{in}} = \bar{\rho} + \delta\rho$ . Dicha región se encuentra embebida en un espacio-tiempo FLRW plano y con densidad equivalente a la densidad de *fondo*  $\bar{\rho}$ . Veamos cómo las condiciones iniciales de expansión equivalente en ambas regiones imponen un universo FLRW con curvatura positiva que describe la inhomogeneidad. Si para un tiempo inicial  $t_i$  se impone una continuidad suave del espaciotiempo, se requiere que en la frontera entre ambas regiones el factor de escala y su derivada temporal (el factor de Hubble) sean idénticos ( $H_{\text{in}} = H$  y  $a_{\text{in}} = a(t)$  respectivamente). Entonces  $H_{\delta} = H$  y a partir de la Ec. (4) se puede escribir

$$H_{\text{in}}^2 = H^2 = \frac{8\pi G}{3}\bar{\rho} = \frac{8\pi G}{3}[\bar{\rho} + \delta\rho - \delta\rho] = \frac{8\pi G}{3}[\rho_{\text{in}} - \delta\rho] = \frac{8\pi G}{3}\rho_{\text{in}} - \frac{K_{\text{in}}c^2}{a_{\text{in}}^2(t_i)}. \quad (10)$$

En consecuencia el modelo indica que la descripción completa de la sobredensidad central requiere de una curvatura positiva de la misma región (es importante recalcar que la región de sobredensidad tiene una  $\rho_{\text{in}}$  homogénea y una curvatura positiva constante). Matemáticamente, la región sobredensa queda descrita por un universo cerrado con curvatura:

$$K_{\text{in}} = \frac{8\pi G}{3c^2}a_{\text{in}}^2(t_i)(\rho_{\text{in}} - \bar{\rho}). \quad (11)$$

Regresando a la forma de la métrica FLRW (1), se deduce que las perturbaciones de densidad encuentran una contraparte en la métrica que modifica el factor de escala transformado en una función del espacio (inhomogénea), como una función dictada por las ecuaciones de Einstein. En una norma específica podemos incluso escribir esta perturbación métrica como un factor conforme a la parte espacial y como factor explícito del factor de escala homogéneo. Es decir, para un universo perturbado, la métrica se modifica con

$$a(t) \rightarrow a(t) \exp[2\zeta(r, t)], \quad (12)$$

de modo que

$$ds_{\text{FLRW}}^2 = -dt^2 + a(t) [r^2 + r^2 d\Omega^2] \quad \Rightarrow \quad ds_{\text{perts}}^2 = -dt^2 + a(t) \exp[2\zeta(r, t)] [r^2 + r^2 d\Omega^2]. \quad (13)$$

Formalmente  $\zeta(r, t)$  representa la perturbación métrica en la norma de densidad uniforme. La norma indica

el tipo de observadores que miden las inhomogeneidades del universo [2], y existen varias expresiones para los grados de libertad que representan las perturbaciones de materia. Esto resulta en distintas expresiones e interpretaciones de las perturbaciones métricas, todas ellas con sustento físico y equivalencias bien establecidas entre sí. En nuestro caso resulta ventajoso trabajar con esta norma ya que directamente hereda características de las fluctuaciones inflacionarias primordiales.

### III. LA TRAVESÍA DE LAS PERTURBACIONES COSMOLÓGICAS

A continuación se describen las etapas de evolución de perturbaciones primordiales, con especial énfasis en los aspectos que trabajamos al seno del Grupo de Gravitación y Cosmología del Instituto de Ciencias Físicas (GGC-ICF).

#### A. Perturbaciones primordiales

En la versión simple del periodo inflacionario, se estipula que un campo escalar llamado inflatón  $\varphi$  domina el contenido de materia del universo. Las condiciones cinemáticas del inflatón y el perfil de su potencial durante inflación son tales que la evolución de la materia, y del espaciotiempo, es casi nula. A partir de la ecuación de Friedmann (4) se infiere que ante una densidad (casi) constante del inflatón dominando sobre todas las otras componentes, el parámetro de Hubble permanece (casi) constante. En consecuencia el factor de escala evoluciona de manera exponencial y esto resulta en periodo inflacionario del espacio-tiempo. Para un periodo extendido de inflación se imponen las condiciones de evolución lenta o rodamiento lento, que pueden expresarse en términos del factor de Hubble. Los llamados parámetros "Hubble flow" de rodamiento lento [3] están motivados por la descripción de la evolución inflacionaria en el contexto del grupo de renormalización, y están dados por

$$\epsilon_{i+1} \equiv d \log |\epsilon_i| / dN, \quad \text{for } i \geq 0 \quad \text{and} \quad \epsilon_0 \equiv H. \quad (14)$$

donde  $N = \ln(a/a_{\text{eoi}})$  es el número de e-foldings de expansión (potencias de  $e$ ) que perdura el periodo inflacionario. La expansión acelerada está garantizada siempre que  $\epsilon_1 < 1$ . En el grupo GGC-ICF hemos estudiado la viabilidad de modelos inflacionarios que cumplan con estos requisitos y que mejor describen a los datos observacionales. Estudios estadísticos se han realizado para potenciales inspirados en física de altas energías, en dos ramas distintas: El model de Inflación Taquiónica [6, 7] y el modelo de inflación natural híbrida [8–10], el cual se aborda en la presentación de Gabriel Germán de esta misma escuela.

En lo que respecta a perturbaciones inflacionarias, la explicación del origen estadístico de las inhomogeneidades yace en las fluctuaciones cuánticas del campo inflacionario. De hecho, la hipótesis de la existencia de estas perturbaciones cuánticas y su confirmación observacional (que mencionaremos más adelante) constituyen el mayor triunfo de la teoría inflacionaria.

Las perturbaciones cuánticas del campo inflacionario se denotan por  $\delta\varphi$ . Estas inhomogeneidades en el contenido de materia resultan de la cuantización del campo escalar, y bajo condiciones de rodamiento lento se encuentra que la desviación estándar (varianza) de una distribución de perturbaciones es no-nula. Debido a su naturaleza cuántica, las inhomogeneidades resultantes  $\delta\varphi$  adquieren un caracter estocástico en donde sus propiedades como tamaño o amplitud adquieren sentido sólo a nivel estadístico. Como veremos más adelante, la amplitud primordial  $\delta\varphi$  se estima a partir de observaciones y resultan en una magnitud aproximada de la perturbación de densidad  $\delta\rho/\bar{\rho} \sim 10^{-5}$ , lo que se encuentra muy bien descrito por la teoría lineal

de perturbaciones. De hecho, la independencia de modos perturbativos (en el espacio de Fourier) a nivel lineal, aunado a la validez del principio ergódico en el universo isotrópico, indican que las perturbaciones primordiales son fluctuaciones Gaussianas donde sólo los primeros dos momentos de la distribución determinan las correlaciones a todos los órdenes (todo esto en completo acuerdo con las observaciones reportadas hasta hoy).

Las perturbaciones de campo tienen un equivalente en inhomogeneidades de curvatura como lo dictan las ecuaciones de Einstein. Estas últimas son construidas a partir de perturbaciones métricas: inhomogeneidades en la métrica de amplitud promedio nula, pero con varianza finita. En términos de funciones de correlación, esto es

$$\langle \zeta(k, t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(k, t) \zeta(k', t) \rangle = H^2 \langle \delta\varphi(k, t) \delta\varphi(k', t) \rangle. \quad (15)$$

Dado que en relatividad general la métrica depende del sistema de referencia, la perturbación métrica depende de los observadores que las determinen. En la ecuación anterior, las perturbaciones métrica se estima en un sistema de referencia de densidad uniforme (donde  $\delta\rho = 0$ ) [2]. Resulta muy útil trabajar con esta cantidad porque su Laplaciano representa justamente la parte inhomogénea de la curvatura espacial (codificada en el escalar de Ricci en 3-D), razón por la cual  $\zeta$  se denomina la perturbación de curvatura. Más aún, para un universo dominado por materia sin presión, puede relacionarse directamente a la amplitud del potencial Newtoniano  $\Phi(x, t)$  relacionado con  $\delta\rho$  a partir de la ecuación de Poisson.

De la misma ecuación (15) se pueden observar dos características importantes: La amplitud de perturbaciones de la métrica presenta características del fondo cosmológico a través del factor de Hubble, arrojando información sobre la escala de energía a la que inflación pudo ocurrir. En segundo lugar, la amplitud de las inhomogeneidades inflacionarias está determinada por el modelo específico de inflación en cuestión. Una parametrización estándar de la amplitud de perturbaciones inflacionarias es

$$\langle \zeta(\mathbf{k}, t) \zeta(\mathbf{k}', t) \rangle = 4\pi \delta_D^3(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) k^3 A_s \left( \frac{k}{k_*} \right)^{n_s - 1} = \delta_D^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') P_s(k), \quad (16)$$

donde  $A_s$  indica la amplitud promedio medida a la escala pivote  $k_* = 0.002 \text{ (MegaParsecs)}^{-1}$ . La potencia  $n_s - 1$  indica la desviación de una función invariante de escala y finalmente la función Delta de Dirac  $\delta_D(x)$  aparece indicando que la magnitud de esta correlación depende de la distancia entre ambos modos y no de la dirección o magnitud individual de los vectores implicados. Esto implica que las inhomogeneidades se encuentran distribuidas de manera homogénea ya que se respeta una invarianza de traslación. Más aún el resto de la expresión muestra que la amplitud sólo depende del módulo  $k$  y no de la dirección  $\mathbf{k}/k$  de los vectores en el espacio de Fourier; esto implica una isotropía estadística del campo de perturbaciones. Estas propiedades quedan asumidas en el espectro de potencias  $P_s(k)$  informalmente entendido como el cuadrado de la amplitud promedio de las perturbaciones de curvatura primordiales.

## B. Evolución fuera del horizonte

Las fluctuaciones primordiales, perturbaciones cuánticas del campo inflacionario, quedan impresas en la perturbación de curvatura  $\zeta$ , con una amplitud promedio de  $\zeta^2 \approx 10^{-9}$ . Durante el periodo inflacionario, el espaciotiempo se expande de manera acelerada y todas estas inhomogeneidades son estiradas hasta escalas fuera del contacto causal (fuera de la escala de Hubble  $r_H = 1/H$ ). Las observaciones demuestran que la subsecuente evolución de perturbaciones es adiabática, es decir, que todas las cantidades físicas dependen de

un sólo parámetro, ya sea el factor de escala, la densidad del universo, o un tiempo fiducial. Esto es debido a que durante el periodo inflacionario la evolución acelerada del factor de escala anula la solución decreciente de las perturbaciones. El resultado es que la etapa subsecuente (el llamado Big-Bang caliente) comienza de manera simultánea en las distintas regiones del universo. Este hecho garantiza que el modo decreciente es nulo desde esta etapa en adelante<sup>1</sup>.

La presencia predominante del modo creciente en perturbaciones resulta entonces en un sólo grado de libertad que se propaga en todas las componentes inhomogéneas del universo. En este sentido las perturbaciones métricas encuentran una interpretación en una perturbación del ritmo de expansión  $\delta t = \zeta/H$  en la norma plana. Es notable que en esta interpretación, la pura ecuación de continuidad para cada una de las componentes determina la amplitud de las perturbaciones de materia, además de su relación con la amplitud del resto de las componentes. De este modo se obtiene la siguiente proporción<sup>2</sup>:

$$\frac{1}{3}\delta_B = \frac{1}{3}\delta_c = \frac{1}{4}\delta_\gamma = \frac{1}{3}\delta_\nu = \frac{1}{H}\zeta \equiv \delta t, \quad (17)$$

donde las componentes  $\{B, c, \gamma, \nu\}$  se refieren respectivamente a bariones, materia oscura fría, fotones y neutrinos; todos ellos importantes en el universo temprano.

Otro aspecto importante de la evolución adiabática es que las perturbaciones de curvatura  $\zeta$  presentan una evolución en un fluido perfecto tal que, a escalas fuera del horizonte,

$$\frac{d\zeta}{dt} = \frac{H}{P + \rho}\delta P_{\text{NAD}} - \frac{1}{3}\Pi, \quad (18)$$

donde  $\Pi$  es la parte escalar del stress anisotrópico en el tensor de energía-momento, y  $P_{\text{NAD}}$  representa la presión no adiabática propia de un fluido con modos no barotrópicos. Ninguna de las dos cantidades es propia del fluido de radiación que domina el universo temprano, ni se ha encontrado observacionalmente un modo no-adiabático de las perturbaciones. Con esto se infiere que fuera del horizonte cosmológico la perturbación de curvatura es constante [12].

En la figura 1 se ilustra cómo las perturbaciones de curvatura en escalas cosmológicas se encuentran fuera del horizonte al final de inflación. Posteriormente el horizonte cosmológico  $r_H = c/H$  crece en tamaño y una a una las escalas de inhomogeneidades re-entran en contacto causal consigo mismas al entrar al horizonte cosmológico. Posteriormente comienzan a crecer y si son de amplitud suficiente pueden colapsar en un agujero negro, llamado agujero negro primordial. Para las perturbaciones de escalas pequeñas (masa menor a  $10^4 M_\odot$ ) no tenemos una observación directa de su amplitud. Lo mejor que podemos hacer es acotar dicha amplitud con cotas superiores provenientes de la abundancia de Agujeros Negros Primordiales. Si la perturbación de curvatura de escalas pequeñas fuera del orden  $\zeta \approx 10^{-1}$  se formarían muchos agujeros negros en etapas tempranas y estos podrían dominar la materia oscura del universo. LA amplitud de las perturbaciones primordiales a pequeña escala no debe entonces exceder los límites observacionales a esta y otras cotas. En el grupo GGC-ICF estudiamos la formación [16, 17] y las consecuencias observacionales que trae la abundancia de los agujeros negros primordiales para acotar los modelos inflacionarios que las producen[8, 9].

---

<sup>1</sup>Esta equivalencia entre la simultaneidad del tiempo de Big Bang y la ausencia del modo decreciente ha sido probado incluso en el régimen no-lineal en trabajos al seno del grupo GGC-ICF [11, 22].

<sup>2</sup>que corresponde a la componente cero de la conservación del tensor de energía-momento.

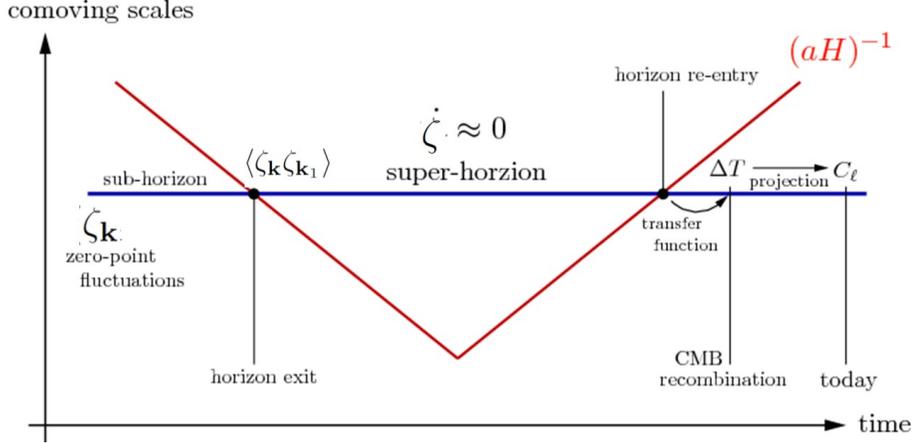


FIG. 1. FIG. 1: Evolución del horizonte cosmológico en coordenadas comóviles  $r_{\mathcal{H}} = c/aH$  en rojo. En azul se representa la escala (tamaño) de las perturbaciones de curvatura  $\zeta$ , que salen del horizonte durante inflación, y al salir adquieren una amplitud que permanece constante fuera del horizonte. Finalmente, al reentrar al horizonte se plasman en el contraste de temperatura (Tomado de: [15]).

### C. La radiación cósmica de fondo

A escalas mayores, las perturbaciones crecen al entrar al horizonte y forman la llamada estructura a gran escala: Galaxias, grupos y cúmulos que crecen desde  $\zeta = 10^{-5}$  hasta llegar a contrastes de densidad del orden  $\delta = 10^3$ . Sabemos sin embargo de la amplitud primordial por las observaciones de la radiación cósmica de fondo. En el universo primordial, los fotones se dispersaron muchas veces con los protones y electrones evitando la formación de átomos. El último momento en que esto sucedió es llamado la última dispersión, y sucedió cuando la escala de energía del universo bajó de los 13.6 eV. de modo que los átomos pudieron formarse y los fotones viajaron libres formando un fondo cósmico que se ha enfriado hasta llegar a nosotros con una temperatura de  $T \approx 3.7$  Kelvin en una señal uniforme de microondas llamada Radiación Cósmica de Fondo (CMB por sus siglas en inglés). Las anisotropías en la métrica y en el contenido de materia generaron también en anisotropías en esta temperatura. Los fotones libres se ven disminuidos en energía al pasar por pozos de potencial (inhomogeneidades de la curvatura) de gran tamaño. A este fenómeno se le conoce como efecto Sachs-Wolfe, y su resultado observacional tiene impacto incluso a escalas que no estaban en contacto causal en el tiempo de la última dispersión. Los pozos de potencial, o equivalentemente, las perturbaciones de curvatura  $\zeta$  que se hallaban a escalas mayores a un grado en el cielo (fuera de contacto causal durante la última dispersión) muestran un valor promedio  $\zeta \approx 10^{-5}$ . Esta observación fue descubierta a través del satélite COBE [13], lo cual dio un premio Nobel a sus investigadores principales George Smoot y John Mather. La importancia del descubrimiento es mayúscula: Se probó que las perturbaciones son iguales para todos los lados que se observe incluso fuera del horizonte cosmológico (consistente con la hipótesis de isotropía y en favor de la teoría inflacionaria), y se mostró el origen de la estructura a gran escala de nuestro universo. Matemáticamente, se encontró que las inhomogeneidades de temperatura a gran escala cumplen

$$\frac{\delta T}{T} = \frac{1}{5} \zeta = [5.42 \times 10^{-9}]^{1/2} \quad (19)$$

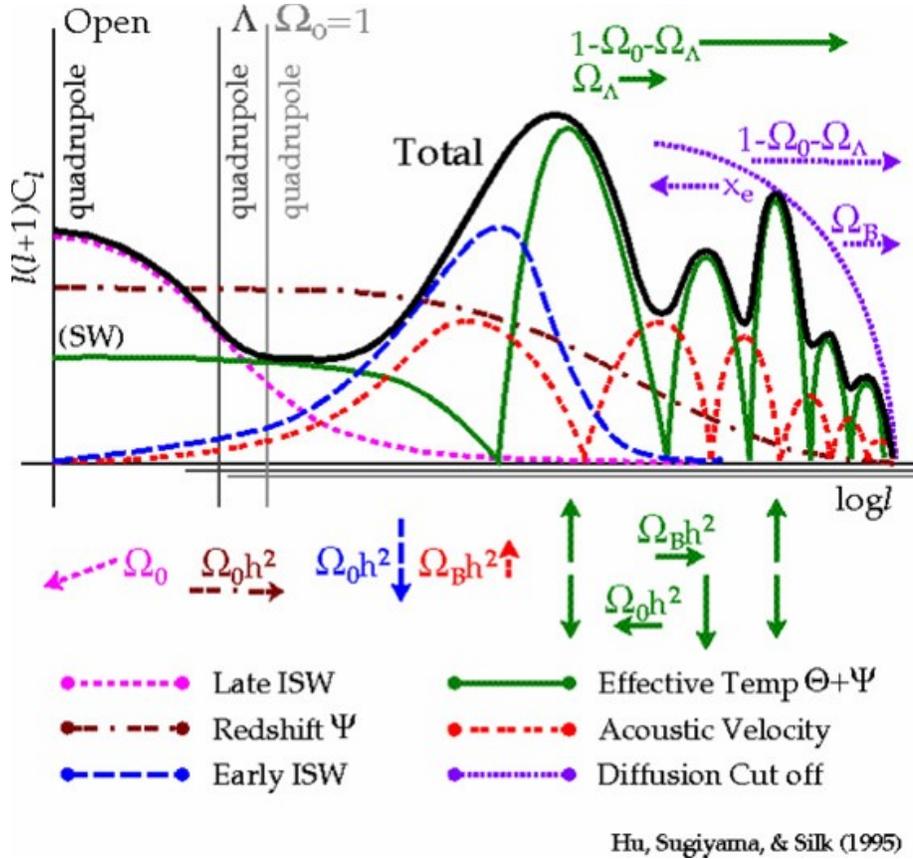


FIG. 2. FIG. 2: Distintas formas de la amplitud de temperatura cambiando los parámetros del modelo cosmológico FLRW. (Tomado de: Hu, Sugiyama y Silk, 1996 [14]).

Además, se ha confirmado desde entonces y hasta las mayores avances actuales que la distribución de probabilidad en perturbaciones primordiales es Gaussiana.

Las perturbaciones observadas en la CMB que si se encontraban en contacto causal nos proveen de información extra de la sopa primordial de partículas cargadas, fotones, neutrinos y materia oscura. De estas observaciones se puede inferir que la curvatura espacial del universo es cero (universo plano), así como la proporción de materia a materia oscura, siendo el CMB la mejor observación para determinar parámetros cosmológicos.

#### D. Formación de estructura cósmica.

Una manera simplificada pero ilustrativa de entender la evolución de perturbaciones es observar su desarrollo a partir del dominio de la materia oscura, a un corrimiento al rojo de  $z = 3500$ . A pesar de ser una época muy temprana en el universo, las inhomogeneidades que entran al horizonte cosmológico a partir de este momento son muy masivas, propias de grupos y cúmulos de galaxias. Las perturbaciones de materia en un universo en expansión dominado por materia sin presión crecen de modo que el contraste de densidad cumple con la

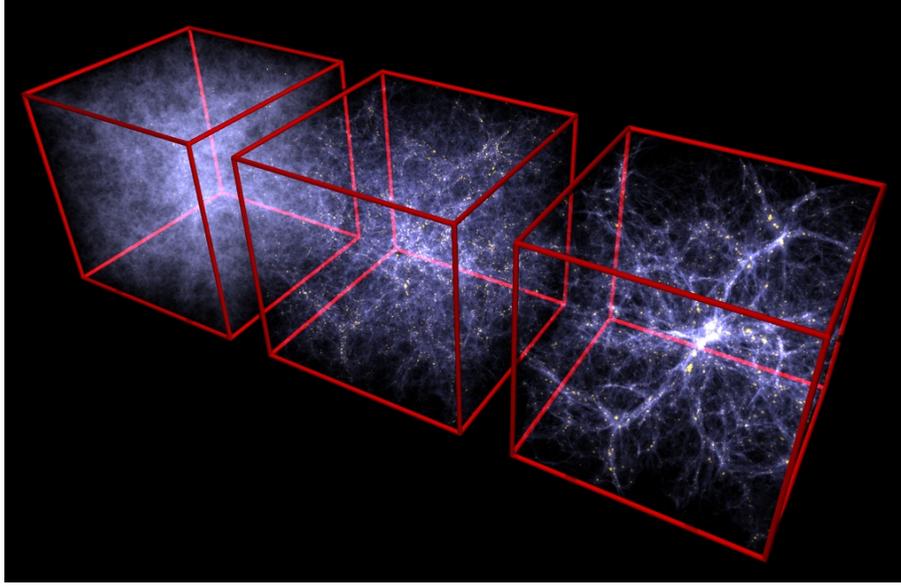


FIG. 3. FIG. 3: Etapas de una simulación de  $N$ -cuerpos modelando la formación de estructura cósmica. (Tomado de simulaciones 3-d de Volker Springer).

ecuación

$$\frac{d^2}{dt^2}\delta + 2H\frac{d}{dt}\delta - 4\pi G\bar{\rho}\delta = 0. \quad (20)$$

La solución creciente a esta ecuación de segundo orden es:

$$\delta = \delta_{IN} \left( \frac{a}{a_{IN}} \right) = \delta_{IN} \left( \frac{t}{t_{IN}} \right), \quad (21)$$

donde las cantidades con subíndice  $_{IN}$  indican un tiempo inicial posterior a la época de equivalencia, 300 000 años después del Big Bang. Las inhomogeneidades en la cola de la distribución (Gaussiana) de amplitudes para alcanzan etapas no-lineales ( $\delta \gtrsim 1$ ) en corrimientos al rojo del orden de  $z \approx 20$ . De hecho, al pasar al régimen no-lineal, las inhomogeneidades crecen mucho más rápidamente que el ritmo en la Ec. (21). Esto es evidente en el modelo del colapso esférico[4, 5].

Para modelar la formación de galaxias y sus conglomerados en el régimen no-lineal, donde ya no son válidas las perturbaciones cosmológicas, se han utilizado de manera recurrente las simulaciones cosmológicas de  $N$ -cuerpos. Dichas simulaciones consisten en una distribución inicial de partículas de materia oscura (cada punto representando una masa del orden de una galaxia) con posiciones iniciales determinadas a partir del espectro de inhomogeneidades de la radiación cósmica de fondo –evolucionado hacia atrás en el tiempo hasta un redshift  $z \approx 50$ . De ahí se deja evolucionar a las partículas entre ellas con una interacción Newtoniana. En la figura 3 se ilustra la evolución de una de estas simulaciones. Dichas simulaciones ayudan a entender los sondeos de galaxias que observan la distribución de materia en distintos redshift.

Un problema para los presentes y futuros sondeos de galaxias es que el volumen de observación está cercano al radio del universo observable (similar al radio de Hubble al día de hoy). El problema es que a escalas tan grandes no se puede estimar que las interacciones entre los elementos de las simulaciones sean inmediatas. En otras palabras, la aproximación Newtoniana es inválida. A nivel perturbativo se han mostrado algunos

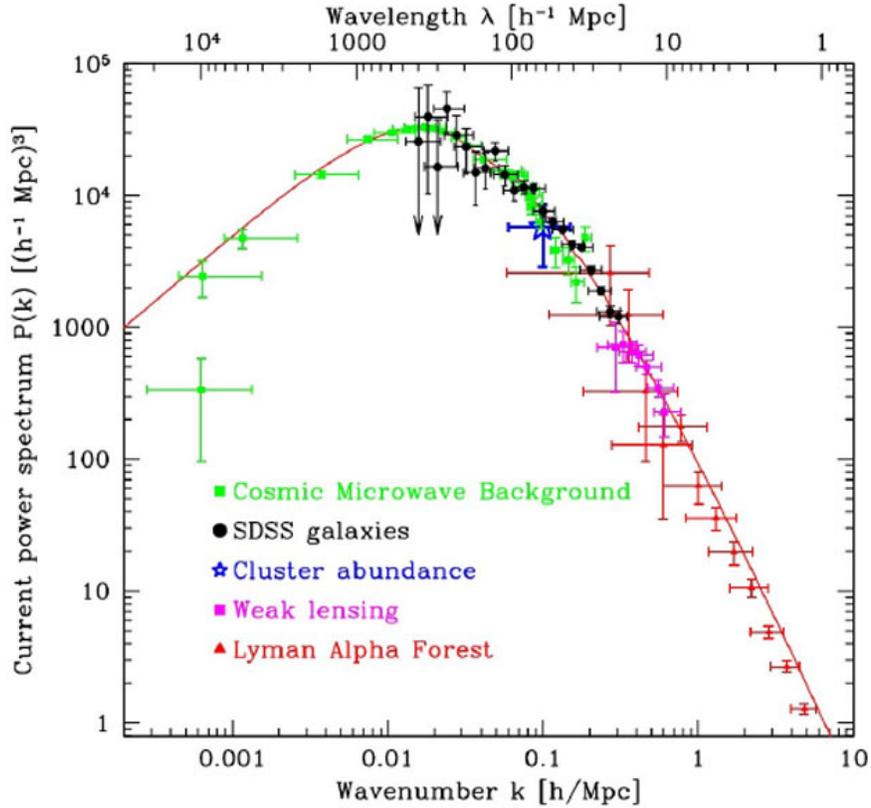


FIG. 4. FIG. 4: Se muestra el espectro evolucionado de perturbaciones de materia. Las observaciones de los modos que entran al horizonte en la época dominada por materia oscura se encuentran en la ladera izquierda. Sólo los cúmulos de galaxias muy grandes pueden modelarse exclusivamente en esta etapa.

efectos de considerar la teoría completa relativista en la evolución de inhomogeneidades cosmológicas [18, 19]. Actualmente estamos por entender el impacto de estas correcciones en el espectro de potencias a segundo orden. En la figura 4 se muestra la amplitud del contraste de densidad en las observaciones combinadas de la radiación CMB y la distribución de galaxias observadas. Esto lo hacemos tanto a nivel perturbativo, con correcciones a las simulaciones de  $N$ -cuerpos [20], como en la evolución de soluciones exactas de la relatividad general, que representen inhomogeneidades individuales y múltiples, que se desarrollan a nivel no-lineal [21, 22]. Esta segunda estrategia en particular está detallada en la charla del Dr. Sussman.

Los efectos relativistas en el problema de la formación de estructura pueden tener consecuencias observables a varios niveles. Actualmente en el grupo GGC-ICF estamos buscando cual será el ritmo de crecimiento de inhomogeneidades a nivel no-lineal. Este ritmo es parametrizado en observaciones por el cociente

$$f = \frac{d \log \delta}{d \log a} \quad (22)$$

y el cual está asociado al momento dipolar de la observación de distorsiones del espectro de potencias en el espacio de redshifts (espacio de longitudes de onda). En las observaciones se mide el producto  $f\delta$ , normalizado a la escala de 8 Megaparsecs, cuyo promedio se escribe  $f\sigma_8$ . Este producto como función del corrimiento al rojo se encuentra graficado en la figura 5. Los datos observacionales muestran cierta discrepancia con el modelo más aceptado de materia oscura con constante cosmológica (los datos caen generalmente por debajo

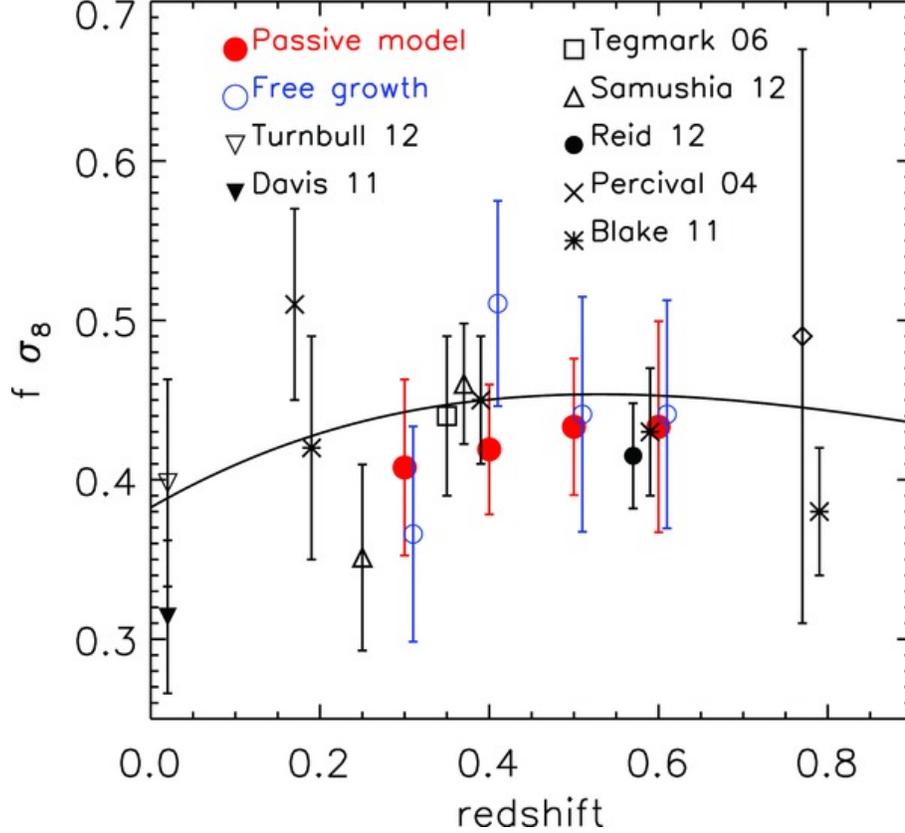


FIG. 5. FIG. 5: Se muestra el producto  $f\sigma_8$  como función de redshift. Se nota que la mayoría de las observaciones caen en regiones por debajo de la predicción (en línea continua) del modelo  $\Lambda - CDM$ .

de la estimación teórica). En el grupo GGC-ICF estamos explorando si el modelo relativista puede ayudar a aminorar la discrepancia.

#### IV. PREGUNTAS ABIERTAS

Aunado al efecto observacional mencionado arriba, existen varios temas que proponemos explorar para entender la relevancia de la Relatividad General en el proceso de formación de estructura y sus observables. A continuación se enlistan una serie de proyectos que tenemos en puerta al seno del grupo GGC-ICF y que pueden ser de interés para estudiantes ávidos de trabajar en temas de cosmología.

- Primeramente estamos explorando cual es el alcance de perturbaciones no-lineales en el entendimiento de observables como el producto  $f\sigma_8$ . Esto es de gran importancia para los trabajos de análisis de observaciones porque, de resolver discrepancias con observaciones, representan sólo una corrección a las técnicas implementadas de simulación e interpretación de observaciones cosmológicas.
- A nivel no-lineal, se está explorando la compatibilidad de simulaciones de  $N$ -cuerpos con la descripción relativista del proceso de formación de estructura. Se entiende que hay normas en las que la descripción de fluido de la materia oscura es equivalente a la descripción relativista. Esto puede representar que el impacto en la formación de estructura sea sólo a nivel de condiciones iniciales. Estamos buscando

simular en computadora las distintas condiciones iniciales y cuantificar sus efectos en observables.

- Una observable específica que estamos estudiando es las oscilaciones acústicas de bariones. Se está buscando simular desde la teoría relativista la evolución de bariones y materia oscura como dos fluidos distintos. La presión de radiación sobre los bariones en el universo temprano ha dejado una huella en la distribución de inhomogeneidades y ahora buscamos la huella que a nivel relativista pudiera tener este fenómeno y sus consecuencias en las observaciones de sondeos de galaxias actuales y futuros.

Todos los lectores son bienvenidos a colaborar en estos proyectos al seno de nuestro grupo. Tenemos programas de estudio y becas diversas para su desarrollo.

- 
- [1] LYTH, D., AND LIDDLE, A. *The Primordial Density Perturbation: Cosmology, Inflation and the Origin of Structure*. Cambridge University Press, 2009.
  - [2] MALIK, K. A., AND WANDS, D. Cosmological perturbations. *Phys. Rept.* **475** (2009), 1–51.
  - [3] D. J. Schwarz, C. A. Terrero-Escalante and A. A. Garcia, *Phys. Lett. B* **517** (2001) 243 doi:10.1016/S0370-2693(01)01036-X [astro-ph/0106020].
  - [4] HARRISON, E. R. Fluctuations at the threshold of classical cosmology. *Phys. Rev. D1* (1970), 2726–2730.
  - [5] E. L. Lokas and Y. Hoffman, astro-ph/0011295.
  - [6] N. Barbosa-Cendejas, J. De-Santiago, G. German, J. C. Hidalgo and R. R. Mora-Luna, *JCAP* **1511** (2015) 020 doi:10.1088/1475-7516/2015/11/020 [arXiv:1506.09172 [astro-ph.CO]].
  - [7] N. Barbosa-Cendejas, J. De-Santiago, G. German, J. C. Hidalgo and R. R. Mora-Luna, arXiv:1711.06693 [astro-ph.CO].
  - [8] M. Carrillo-Gonzalez, G. Germn-Velarde, A. Herrera-Aguilar, J. C. Hidalgo and R. Sussman, *Phys. Lett. B* **734** (2014) 345 doi:10.1016/j.physletb.2014.05.062 [arXiv:1404.1122 [astro-ph.CO]].
  - [9] J. A. Vazquez, M. Carrillo-Gonzalez, G. Germn, A. Herrera-Aguilar and J. C. Hidalgo, *JCAP* **1502** (2015) no.02, 039 Addendum: [*JCAP* **1510** (2015) no.10, A01] doi:10.1088/1475-7516/2015/02/039, 10.1088/1475-7516/2015/10/A01 [arXiv:1411.6616 [astro-ph.CO]].
  - [10] G. Germn, A. Herrera-Aguilar, J. C. Hidalgo, R. A. Sussman and J. Tapia, *JCAP* **1712** (2017) no.12, 003 doi:10.1088/1475-7516/2017/12/003 [arXiv:1707.00957 [astro-ph.CO]].
  - [11] R. A. Sussman, *Class. Quant. Grav.* **30** (2013) 235001 doi:10.1088/0264-9381/30/23/235001 [arXiv:1305.3683 [gr-qc]].
  - [12] D. H. Lyth, K. A. Malik and M. Sasaki, *JCAP* **0505** (2005) 004 doi:10.1088/1475-7516/2005/05/004 [astro-ph/0411220].
  - [13] C. L. Bennett *et al.*, *Astrophys. J.* **464** (1996) L1 doi:10.1086/310075 [astro-ph/9601067].
  - [14] W. Hu, N. Sugiyama and J. Silk, *Nature* **386** (1997) 37 doi:10.1038/386037a0 [astro-ph/9604166].
  - [15] D. Baumann, doi:10.1142/9789814327183-0010 arXiv:0907.5424 [hep-th].
  - [16] E. Torres-Lomas, J. C. Hidalgo, K. A. Malik and L. A. Urea-Lpez, *Phys. Rev. D* **89** (2014) no.8, 083008 doi:10.1103/PhysRevD.89.083008 [arXiv:1401.6960 [astro-ph.CO]].
  - [17] J. C. Hidalgo, J. De Santiago, G. German, N. Barbosa-Cendejas and W. Ruiz-Luna, *Phys. Rev. D* **96** (2017) no.6, 063504 doi:10.1103/PhysRevD.96.063504 [arXiv:1705.02308 [astro-ph.CO]].
  - [18] M. Bruni, J. C. Hidalgo, N. Meures and D. Wands, *Astrophys. J.* **785** (2014) 2 doi:10.1088/0004-637X/785/1/2 [arXiv:1307.1478 [astro-ph.CO]].
  - [19] M. Bruni, J. C. Hidalgo and D. Wands, *Astrophys. J.* **794** (2014) no.1, L11 doi:10.1088/2041-8205/794/1/L11 [arXiv:1405.7006 [astro-ph.CO]].
  - [20] A. J. Christopherson, J. C. Hidalgo, C. Rampf and K. A. Malik, *Phys. Rev. D* **93** (2016) no.4, 043539 doi:10.1103/PhysRevD.93.043539 [arXiv:1511.02220 [gr-qc]].

- [21] R. A. Sussman, I. Delgado Gaspar and J. C. Hidalgo, JCAP **1603** (2016) no.03, 012 Erratum: [JCAP **1606** (2016) no.06, E03] doi:10.1088/1475-7516/2016/06/E03, 10.1088/1475-7516/2016/03/012 [arXiv:1507.02306 [gr-qc]].
- [22] R. A. Sussman, J. C. Hidalgo, I. Delgado Gaspar and G. Germán, Phys. Rev. D **95** (2017) no.6, 064033 doi:10.1103/PhysRevD.95.064033 [arXiv:1701.00819 [gr-qc]].

# LA FÍSICA POSITIVA DE LOS IONES NEGATIVOS

Guillermo Hinojosa

Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM- Campus Morelos.

Los iones negativos o aniones son la entidad cuántica más difícil de modelar en física. Para explicar su estabilidad se necesitan los modelos más sofisticados de la mecánica cuántica y aun así, resultan insuficientes para explicar con precisión los aniones moleculares más simples. Su naturaleza elusiva y su extrema rareza contrastan con su enorme abundancia en el Universo y su omnipresencia en diversos plasmas y ambientes atmosféricos. Más aún, su aplicaciones en aceleradores y en medicina los han convertido en una clase de iones con grandes expectativas comerciales. A continuación presento una propuesta para estudiantes trabajadores.

---

Al momento de escribir este ensayo para la Escuela de Verano, sigue abierto para más publicaciones un número especial de la revista *New Journal of Physics* [1] que dedica un número especial a la generación de iones negativos. Esto demuestra la novedad y la gran efervescencia en este tópico de la ciencia.

El cómo una molécula neutra atrapa un electrón extra y forma un ión negativo estable es una interrogante actual para la ciencia [2]. Recientemente, la confirmación de aniones moleculares simples en el medio interestelar [3] ha revivido el interés en tratar de comprender estos rarísimos iones. Los estudios experimentales sobre estos iones son escasos debido a las dificultades técnicas para producirlos. Modelar estos iones también es un reto para la teoría ya que para explicar su estabilidad es necesario tomar en cuenta los efectos de la correlación electrónica aun para los casos más simples. Los modelos basados en la aproximación de Hartree y Fock fallan incluso en predecir la estabilidad del  $H^-$ . De hecho, ni la distorsión de los orbitales de enlace, ni la polarización aunada al apantallamiento neto del núcleo causadas por la presencia de un electrón extra pueden explicar, por si solos, la estabilidad de estos extravagantes iones.

Existen preguntas en diversos campos de la ciencia en donde se cree que los iones negativos pueden ser parte de la explicación. Por ejemplo:

- ¿Por qué los iones negativos son tan abundantes en el medio interestelar (MI)? En este medio solamente existen átomos que están separados por grandes distancias, expuestos a la radiación de las estrellas. Entonces si no pueden interactuar con nada y la radiación, en princio, los disocia ¿cómo se forman?
- ¿Cuál es el mecanismo de formación del polvo en el MI? ¿Cómo se forman los agregados necesarios para terminar formando granulación en un ambiente donde no hay nada?
- ¿Por qué ningún modelo cuántico puede predecir las energías de ligadura (o *afinidades electrónicas*) con suficiente precisión? La situación es peor si se trata su estructura porque -resulta- que los iones negativos tienen estados excitados electrónicos.
- ¿Cómo se forman? Investigación reciente confirmó que el mecanismo de *captura radiativa*, que se pensó -por décadas- era la forma en que creaban, no es suficiente para explicar sus abundancias.

- ¿Por qué los iones negativos matan a las bacterias? ¿Por qué tienen efectos positivos en la conducta de las personas?
- ¿Por qué el  $H^-$  es tan especial? ¿por qué no sigue las reglas del modelo geométrico en colisiones? ¿Por qué es tan difícil generarlo en los laboratorios y aun así es tan abundante en el MI?

Hay quienes dicen que hay un premio Nobel para cada una de las respuestas a estas preguntas. Quizá por su carácter general ya que inciden en muchas áreas. A continuación presento una breve introducción a lo que se sabe y lo que se puede hacer para tratar de comprender a los iones negativos.

En la física de los plasmas, existen fenómenos en los que el conocimiento detallado de estos aniones es esencial. Por ejemplo, en descargas incandescentes en plasmas capacitivos inducidos por radiofrecuencia, se ha encontrado que la formación de polvo está correlacionada con la abundancia de aniones moleculares [4]. La introducción de iones negativos podría resultar en una simplificación de los modelos de plasmas fríos [5]. Por ejemplo, Horvart *et al.* [6] propuso la presencia de iones negativos como una alternativa a procesos de disociación que resultan de la captura electrónica en un plasma con una mezcla de  $N_2$  y  $CH_4$  para una simulación de laboratorio de la atmósfera de Titán.

En astrofísica, recientemente y gracias a esfuerzos combinados entre teoría y observaciones espectroscópicas, se lograron identificar al menos seis aniones moleculares con cadenas simples de carbón en el MI [7]. Los aniones moleculares se han confirmado también en la coma del cometa Haley [5] y en la ionósfera de Titán [8]. Es posible que estos aniones tengan roles importantes en la formación del polvo de aerosol observado en la composición de la atmósfera de Titán. También, el origen de la *banda difusa* del MI que es la pregunta más importante de la espectroscopía, se ha atribuido a la presencia de aniones negativos moleculares [3]. Sin embargo, la falta de estudios experimentales constituye a la fecha la principal necesidad para contestar preguntas como estas.

¿Cómo se forman aniones en un ambiente tan frío como el MI o en plasmas densos? Por décadas se pensó que el mecanismo era *la captura radiativa*, sin embargo este proceso ha sido recientemente refutado [2] y deja como una gran interrogante el origen de estos iones.

En este ensayo para la Escuela de Verano, se pone a consideración para los estudiantes la implementación de un *mapeador de velocidades con imágenes* (al que se referirá como MVI) como un posible proyecto en torno al cuál se pueden desarrollar proyectos de tesis desde licenciatura, doctorado y conseguir trabajo tanto en el área de física como de la química. Esta clase de espectrómetros se usan para medir afinidades electrónicas y posibles estados excitados de aniones (su estructura). Este espectrómetro consiste en un tubo de tiempo de vuelo modificado para generar imágenes de distribuciones de electrones sobre un detector. El laboratorio del ICF cuenta con las componentes más caras y sofisticadas del experimento que son (1) un acelerador de partículas negativas y (2) una fuente de luz láser entonable en infrarrojo.

Un espectrómetro MVI es una de las herramientas más avanzadas en el campo. Son muy pocas las fuentes bibliográficas en donde se puede apreciar el diseño de estos espectrómetros. Además, las referencias disponibles en la literatura ofrecen pocos detalles sobre su diseño. Afortunadamente, se tuvo la oportunidad de conocer a fondo el espectrómetro MVI de la

Universidad de Nevada, Reno (UNR). El espectrómetro de la UNR tiene características comunes con todos los espectrómetros disponibles que a continuación se describen para comparar con el que se propone.

Los espectrómetros MVI de los que tenemos referencia están asociados a aceleradores con fuentes de iones de pulverización (*sputtering*) que no generan aniones moleculares simples y que son relativamente ineficientes para generar especies negativas con masas pequeñas, de hecho, no producen  $H^-$ . Además, tienen la peculiaridad de producir dispersión en el haz a energías por abajo de 10 keV. Calidad que dificulta su operación a bajas energías. La razón del uso generalizado de esta clase de fuentes de iones, puede ser que se deba a que son las fuentes que se usan para estudios de datación con  $^{14}C$ . Una nota interesante es que la datación con  $^{14}C$  se hace a partir de iones negativos de carbono. Con iones positivos no se puede debido a la contaminación de  $^{14}N^+$ . El nitrógeno no genera aniones estables y es entonces que el método de datación esta basado en iones negativos.

En este experimento, un haz de aniones es intersectado perpendicularmente por un haz láser. Como resultado de la interacción, los electrones débilmente ligados al anión se desprenden como función de la longitud de onda del láser y de la velocidad de traslación de los aniones del haz (ver Fig. 1). El espectrómetro *mapea* la distribución de electrones que se genera en el punto de interacción.

Un efecto no deseado en las distribuciones de electrones es la deformación de la distribución de electrones debido a la velocidad de traslación del haz de aniones. Este efecto es despreciable a velocidades bajas. A energías altas, la deformación cinemática indeseable en las distribuciones de electrones [9] no se puede despreciar y se complica aún más porque el espectrómetro realiza una transformación adicional del punto de interacción de los haces hacia una imagen. Es muy importante que la velocidad del haz de aniones sea lo más baja posible, sin perder las características de colimación y enfoque. Por lo tanto, la combinación de fuentes de iones (de pulverización) que funcionan bien a altas energías y que son ineficientes para producir aniones moleculares simples con espectrometros MVI explica la falta de datos para moléculas simples.

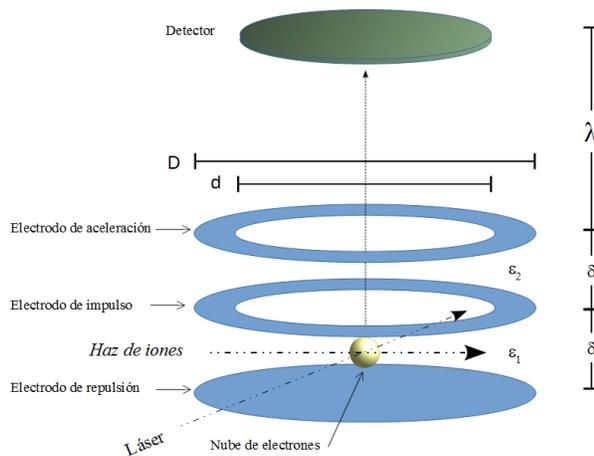


Figura 1: Para ilustrar el principio de funcionamiento del espectrómetro MVI. El haz de aniones y el láser se cruzan en el mismo plano. Los electrones que resultan de la interacción forman una distribución. Esta nube de electrones es impulsada hacia el detector por el campo eléctrico. La combinación de dos campos eléctricos es tal que produce una imagen en el detector ver Fig. 3.

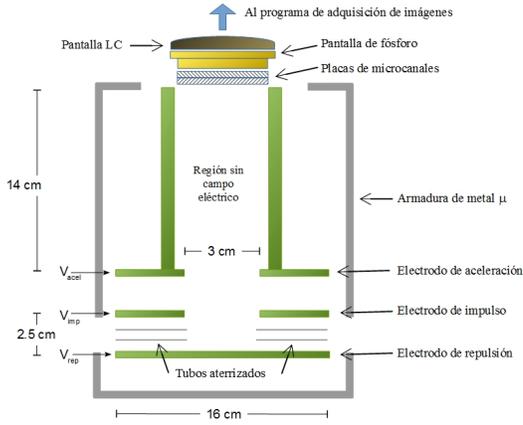
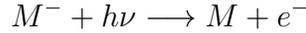


Figura 2: Esquema del espectrómetro MVI (o *VMI* por sus siglas en inglés) de la Universidad de Nevada, Reno.

tuyen las herramientas más costosas del experimento. Ya se tienen.

A continuación se describe el principio de funcionamiento del MVI. La idea consiste fundamentalmente en un espectrómetro de tiempo de vuelo (ver Fig. 1). En una primera región del espectrómetro se cruzan los haces de aniones ( $M^-$ ) y el haz de luz láser  $h\nu$ . En esta región hay un campo eléctrico  $\epsilon_1$  que acelera a los electrones  $e^-$  producidos por el despojo electrónico inducido por fotones:



El segundo campo eléctrico  $\epsilon_2$  tiene el efecto de *enfocar* la distribución de electrones en el detector. La zona de tiempo de vuelo se indica con  $\lambda$  en la Fig. 1. La relación ideal entre los valores de los campos eléctricos  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  y de las distancias  $\delta$  y  $\lambda$  se deriva de minimizar el elemento finito de la región en donde se genera la nube de electrones. Además se usan simulaciones de las trayectorias de los electrones. El espectrómetro debe tener aislamiento del campo magnético terrestre (que se logra con una armadura de metal  $\mu$  ver Fig. 2).

Las Figs. 3 y 4 muestran imágenes de distribuciones de electrones sin reducir que yo medí con el MVI de la UNR. La distribución de electrones del  $P^-$  es simétrica mientras que la del  $H_2O^-$  tiene lóbulos paralelos a la dirección de polarización del láser. Las distribuciones se pueden interpretar con ayuda del teorema de Yang [11] con el que se puede argumentar que las distribuciones de electrones resultantes del foto-despojo toman la forma:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \beta P_2(\cos(\theta)) \quad (1)$$

en donde  $d\sigma/d\Omega$  es la sección diferencial como función del ángulo polar,  $\beta$  es conocido como el factor de asimetría y  $P_2(\cos(\theta))$  es el polinomio de segundo grado de Legendre. El factor

<sup>1</sup>Ejemplos:  $C_2H_2^-$ ,  $CH^-$ ,  $CN^-$ ,  $CH_4^-$ ,  $H_3O^-$  y el  $H_2O^-$ .

<sup>2</sup>NL301 de EKSPLA.

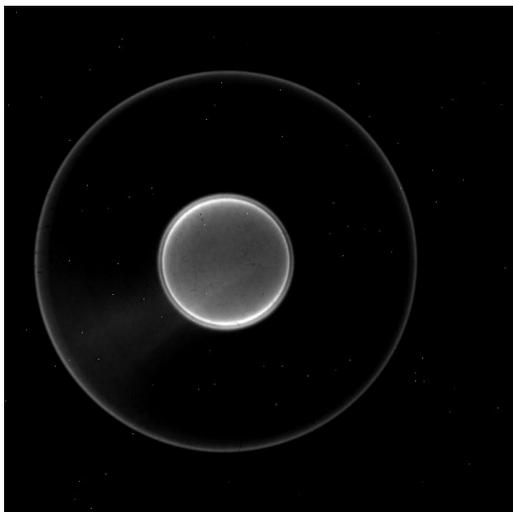
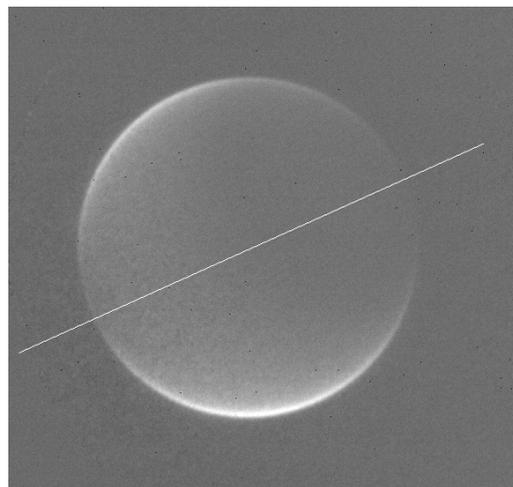


Figura 3: Imagen de la distribución de electrones medida con el espectrómetro MVI de la UNR. El espectro corresponde al despojo inducido por fotones:  $P^- + h\nu \rightarrow P + e^-$  la energía del haz es 10 keV y  $\lambda = 532$  nm (2.3 eV). Los tres anillos que se pueden apreciar corresponden a los estados ligados  $(3s^23p^4)^3P_{2,1,0}$ .

Figura 4: Imagen de la distribución de electrones producidos por el despojo inducido por fotones de  $H_2O^-$ . La línea indica la dirección del haz de iones y la dirección de polarización del láser. La energía del haz de iones es 10 keV y  $\lambda = 532$  nm (2.3 eV). Para obtener este espectro se acumularon datos por más de seis horas después de varios intentos fallidos debido a la inestabilidad del haz que en el caso del agua es un contaminante de la fuente de iones.



de asimetría es lo que caracteriza la forma de la distribución de electrones, es entero y está restringido a  $\beta \in [-1, 2]$ . Como prueba de que es factible medir distribuciones de electrones de aniones moleculares se presenta el resultado de una medición el anión de agua que yo medí con el MVI de la UNR en la Fig. 4. Se aprecia la dificultad de la medición debido a la mala estadística (pocos aniones). En la figura se indica la dirección del haz de iones con una línea recta que también coincide con la dirección de la polarización del láser. Estos datos son preliminares. Pero se aprecia un solo disco que es resultado de que el agua aparentemente solo tiene un estado estable aniónico. Este resultado, por sí solo es muy novedoso y pronostica un gran impacto en el campo.

Valores de las afinidades electrónicas de la mayoría de los aniones moleculares simples aún no se han medido. Estas mediciones aguardan a estudiantes de ciencias que deseen abordar con entusiasmo una gran oportunidad para en la ciencia en México.-

## Referencias

- [1] *New Journal of Physics*, 18, 2016.
- [2] Marjan et al. Khamesian. Formation of  $CN^-$ ,  $C_3N^-$ , and  $C_5N^-$  molecules by radiative electron attachment and their destruction by photodetachment. *Phys. Rev. Lett.*, 117:123001, **2016**.
- [3] Ryan C. Fortenberry. Interstellar anions: The role of quantum chemistry. *J. Phys. Chem. A*, 119(39):9941–9953, **2015**. PMID: 26237230.
- [4] Ch. et al. Hollenstein. Anionic clusters in dusty hydrocarbon and silane plasmas. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 14(2):535–539, 1996.
- [5] M. A. Cordiner and S. B. Charnley. Negative ion chemistry in the coma of comet 1P/Halley. *Meteoritics & Planetary Science*, 49(1):21–27, **2014**.
- [6] G Horvath et al. Corona discharge experiments in admixtures of  $N_2$  and  $CH_4$ : a laboratory simulation of titan's atmosphere. *Plasma Sources Science & Technology*, 18(3):034016, **2009**.
- [7] M Larsson et al. Ion chemistry in space. *Reports on Progress in Physics*, 75(6):066901, 2012.
- [8] V. Vuitton et al. Negative ion chemistry in titan's upper atmosphere. *Planetary and Space Science*, 57:1558 – 1572, **2009**.
- [9] E.W. et al. McDaniel. *Atomic collisions: Heavy-particle projectiles*. 1993.
- [10] E M Hernandez et al. Electron detachment cross sections of  $CH_4^-$  colliding with  $O_2$  and  $N_2$  below 10 keV energies. *Plasma Sources Science & Technology*, 23(1):015018, **2014**.
- [11] Kiattichart Chartkunchand. *Photodechment studies of atomic negative ions through velocity-map imaging spectroscopy*. PhD thesis, University of Nevada, Reno, 2015.
- [12] A. Ramírez-Solís. On the accuracy of the complete basis set extrapolation for anionic systems: A case study of the electron affinity of methane. *Computational Chemistry*, 02(02):31, **2014**.



# Respuesta magnética de metamateriales

Lucila Juárez y W. Luis Mochán  
Instituto de Ciencias Físicas, UNAM  
Cuernavaca, Morelos

## Resumen

Discutimos la respuesta magnética a bajas frecuencias de un metamaterial compuesto por cilindros metálicos no magnéticos embebidos en un aislante. Obtenemos expresiones para dicha respuesta basada en la dispersión espacial de la respuesta dieléctrica macroscópica del sistema. La respuesta magnética proviene de los cambios en la respuesta dieléctrica asociados a la no uniformidad del campo eléctrico. Desarrollamos un modelo sencillo para el caso de cilindros concéntricos con cortes laterales que permite calibrar cálculos numéricos que posteriormente emplearemos para geometrías arbitrarias.

## 1. Introducción

Los metamateriales son sistemas artificiales compuestos de arreglos periódicos de microestructuras cuya configuración, geometría y composición determinan su respuesta óptica macroscópica. Controlando la microestructura es posible diseñar metamateriales con propiedades ópticas exóticas, que no se encuentran de forma natural en ningún material. Un ejemplo interesante son los metamateriales conocidos como *izquierdos* [1, 2]. En éstos existen rangos de frecuencia  $\omega$  en los cuales tanto la permitividad eléctrica  $\epsilon(\omega)$  como la permeabilidad magnética  $\mu(\omega)$  son negativas [3]. La ley de inducción de Faraday implica que para una onda plana el campo eléctrico  $\mathbf{E}$ , la inducción magnética  $\mathbf{B}$  y el vector de onda  $\mathbf{k}$  forman una triada ordenada derecha. De igual forma, la ley de Ampere-Maxwell implica que  $\mathbf{E}$ , el campo magnético  $\mathbf{H}$  y el flujo de energía, descrito por el vector de Poynting  $\mathbf{S}$ , también forman una triada derecha. En los metamateriales *izquierdos*  $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$  tiene la dirección opuesta a  $\mathbf{H}$ , la triada ordenada  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{k}$  es izquierda y  $\mathbf{S}$  apunta en la dirección opuesta a  $\mathbf{k}$  [4, 3, 5]. La conservación del ímpetu a lo largo de una superficie plana de uno de estos metamateriales implica entonces que al refractarse en ella una onda se obedece la ley de Snell pero con un índice de refracción negativo (IRN). Así, los rayos que divergen de una fuente luminosa pueden converger sobre un punto focal después de ser refractados por superficies planas. Aprovechando este efecto es posible, por ejemplo, formar imágenes que alcancen resoluciones por debajo del límite de difracción [6, 7].

Es posible producir un metamaterial izquierdo a partir de incrustaciones metálicas en un medio dieléctrico, donde la geometría de las microestructuras dé origen a una respuesta magnética aún cuando los componentes no sean magnéticos[8]. Un sistema sencillo que ilustra este efecto es un arreglo periódico de tubos cilíndricos metálicos de conductividad muy alta. Un campo magnético oscilando en la dirección del eje del cilindro induciría un campo eléctrico, produciendo una corriente que circularía sobre la superficie de cada cilindro. Esta corriente generaría a su vez un campo magnético en la dirección opuesta al campo inicial, como si el metamaterial fuese diamagnético. El promedio de ésta respuesta dentro de todas las celdas que componen el metamaterial determina la permeabilidad magnética macroscópica del sistema. Un cálculo muy simple muestra que la permeabilidad efectiva de este sistema sería simplemente  $\mu = 1 - f$  donde  $f$  es la fracción de llenado de los cilindros. Si bien este sistema simple ilustra cómo obtener una respuesta magnética en un metamaterial fabricado con componentes no magnéticas, esta geometría no da lugar a una permeabilidad negativa.

Un sistema un poco más complejo, con el cual sí es posible obtener una permeabilidad  $\mu < 0$  es un arreglo de tubos cilíndricos metálicos con una apertura lateral a través de la cual la corriente no puede fluir, causando así una acumulación de carga. El sistema se comporta entonces como un circuito LC (inductor-capacitor) capaz de resonar a una frecuencia característica determinada por la geometría del sistema [9, 10]. Para frecuencias ligeramente superiores a la frecuencia de resonancia es posible obtener valores negativos de la permeabilidad magnética.

Diversos metamateriales con  $\mu < 0$  han sido fabricados con éxito, principalmente para frecuencias en el rango de los GHz y THz [11, 12]. Para estas frecuencias, la estructura utilizada más frecuentemente se conoce en inglés como resonador de anillos partidos (o *split-ring resonator* SSR en inglés), y consiste en un par de espiras metálicas concéntricas con cortes laterales en direcciones opuestas. Un arreglo periódico tridimensional de SSRs, en combinación con una malla de alambres delgados forman un sistema que puede presentar tanto un  $\mu < 0$  como un  $\epsilon < 0$ , y por tanto un índice de refracción negativo, en un rango de frecuencias que puede ser controlado variando ciertos parámetros de la estructura, como el tamaño, ancho y separación entre las espiras. Sin embargo, como hemos mencionado, este tipo de sistemas opera generalmente en un rango de GHz-THz. La posibilidad de manipular los parámetros de estos sistemas para lograr IRNs a frecuencias más altas está limitada por el tamaño mínimo requerido para la fabricación de los anillos. Sería por lo tanto importante contar con un método que nos permita explorar geometrías más complejas y estructuras hechas de materiales diversos, con las cuales podamos generar resonancias en otras frecuencias.

El propósito de este artículo es presentar y validar un método de cálculo de la permeabilidad de un metamaterial que en principio permitiría estudiar metamateriales arbitrarios, con geometría arbitraria y con materiales que puedan ser tanto aislantes como conductores, dispersivos y disipativos o no. La estructura del artículo es la siguiente: En la eqn (2) calculamos la permeabilidad

magnética efectiva de un sistema sencillo compuesto de una red de parejas de cilindros concéntricos con aperturas laterales, en el límite de longitud de onda larga, asumiendo que las paredes de los cilindros son perfectamente conductoras e infinitamente delgadas. Este sistema es una referencia que permite hacer predicciones simples que pueden ser comparadas con modelos de mayor generalidad. En la sección 3 mostramos cómo se puede obtener la respuesta magnética de un metamaterial a partir de la *no localidad* de su respuesta dieléctrica. En la sección 4 presentamos un método recursivo muy eficiente que nos permite calcular la respuesta dieléctrica *no local* de metamateriales de geometría y composición arbitraria, y por ende de su respuesta magnética. En la sección (5) obtenemos algunos resultados para sistemas simples de los cuales obtenemos la respuesta dieléctrica y comparamos su no localidad con la respuesta magnética. Finalmente, en la sección 6 presentamos nuestras conclusiones.

## 2. Modelo simple

En esta sección estudiaremos la permeabilidad magnética efectiva de un metamaterial formado por una red cuadrada de cilindros metálicos en el límite de bajas frecuencias y longitud de onda larga. Cada celda unitaria de la red contiene un par de cilindros concéntricos que tienen una apertura lateral a través de la cual se interrumpe el flujo de corriente eléctrica. La apertura de los cilindros se encuentra en direcciones opuestas como se muestra en la figura 1.

Consideremos un campo externo de inducción magnética uniforme  $\mathbf{B}^{\text{ex}}(t) = \text{Re}B^{\text{ex}}e^{-i\omega t}\hat{z}$  que apunta en la misma dirección  $z$  que el eje de los cilindros y oscila a frecuencia  $\omega$ , donde  $\text{Re}(\dots)$  denota que debemos tomar la parte real de la cantidad compleja ( $\dots$ ), lo cual haremos implícitamente en adelante. El flujo de este campo induce un campo eléctrico que impulsa una corriente superficial a lo largo de la circunferencia de los cilindros conductores. Asimismo, esta corriente eléctrica produce un campo magnético inducido que a su vez genera una contribución adicional al campo eléctrico y a la corriente misma. Por otro lado, los cilindros tienen una apertura que impide el flujo de corriente, por lo cual la corriente eléctrica inducida no será homogénea, sino que variará alrededor de los cilindros y generará acumulaciones de carga que serán una fuente adicional de campo eléctrico. Haremos los cálculos en la aproximación de longitud de onda larga, es decir, supondremos que la frecuencia y el vector de onda son pequeños cuando los normalizamos con el tiempo que tarda la luz en recorrer la estructura y el tamaño de la estructura respectivamente.

Analicemos primero el caso de un solo cilindro de radio  $a$ . Como discutimos arriba, debido a presencia de la apertura, el campo magnético externo da lugar a una corriente superficial no uniforme  $\mathbf{K}(\theta) = K(\theta)\hat{\theta}$  que oscila con la misma frecuencia  $\omega$ , donde  $\theta$  es el ángulo alrededor del eje  $z$  medido desde el eje  $x$  en la dirección de  $x$  a  $y$ , y  $\hat{\theta}$  es un vector unitario tangencial a la superficie y ortogonal al eje  $z$ , como muestra la fig. 1. Note que el problema posee simetría translacional a lo largo del eje  $z$  y hemos colocado la apertura de los cilindros de tal forma que el sistema sea simétrico con respecto al eje  $x$ . De este modo,

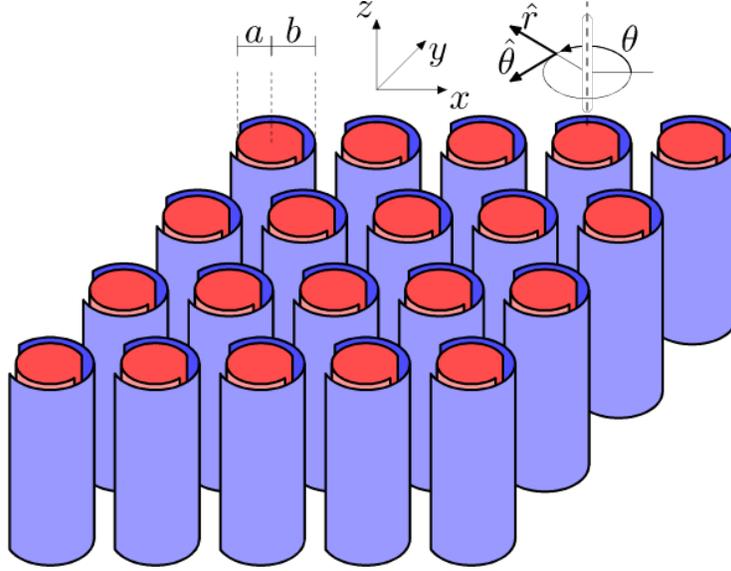


Figura 1: Red cuadrada de cilindros conductores concéntricos con un corte lateral. Se muestran los radios de ambos cilindros, los ejes coordenados, el ángulo  $\theta$  y los vectores unitarios  $\hat{\theta}$  y  $\hat{r}$ .

podemos expresar la corriente como una serie de Fourier en cosenos,

$$K(\theta) = \sum_l K_l \cos(l\theta). \quad (1)$$

De acuerdo a la ley de conservación de la carga, una corriente inhomogénea produciría una acumulación de carga que en dos dimensiones podemos describir mediante una densidad superficial de carga  $\sigma(\theta)$ . De la ecuación de continuidad en dos dimensiones,

$$\frac{\partial}{\partial t} \sigma + \nabla_{\parallel} \cdot \mathbf{K} = 0 \quad (2)$$

obtenemos

$$\sigma(\theta) = \sum_l \sigma_l \sin(l\theta), \quad (3)$$

donde

$$\sigma_l = \frac{il}{\omega a} K_l. \quad (4)$$

La carga acumulada origina un potencial electrostático  $\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(r, \theta)$  que cumple con la ecuación de Laplace  $\nabla^2 \Phi(r, \theta) = 0$  tanto afuera del cilindro  $r > a$  como adentro del cilindro  $r < a$ . Empleando la solución general de la ecuación

de Laplace en coordenadas polares, obtenemos

$$\Phi(r, \theta) = \sum_l \begin{cases} \phi_l^d r^l \sin(l\theta), & (r < a) \\ \phi_l^f r^{-l} \sin(l\theta), & (r > a) \end{cases} \quad (5)$$

donde empleamos la condición de que el potencial producido por el cilindro no debe divergir en  $r = 0$  ni en  $r \rightarrow \infty$  e introducimos las constantes a determinar  $\phi_l^d$  y  $\phi_l^f$ .

El potencial (5) produce un campo eléctrico longitudinal  $\mathbf{E}^L = -\nabla\Phi(\mathbf{r})$  cuya componente a lo largo de la dirección radial  $\hat{\mathbf{r}}$  (fig. 1) escribimos como

$$E_r^L(r, \theta) = \sum_l E_{rl}^L(r) \sin(l\theta), \quad (6)$$

donde

$$E_{rl}^L(r) = \begin{cases} -\phi_l^d l r^{l-1}, & (r < a) \\ \phi_l^f l r^{-l-1}. & (r > a) \end{cases} \quad (7)$$

La continuidad  $\Phi(a^-, \theta) = \Phi(a^+, \theta)$  del potencial electrostático (5) en  $r = a$  implica

$$\phi_l^d a^l - \phi_l^f a^{-l} = 0. \quad (8)$$

Por otro lado, el campo eléctrico radial (7) tiene una discontinuidad  $E_r(a^+, \theta) - E_r(a^-, \theta) = 4\pi\sigma(\theta)$  determinada por la carga superficial (ec. (4)), de donde

$$\phi_l^f l a^{-l-1} + \phi_l^d l a^{l-1} = 4\pi\sigma_l. \quad (9)$$

De las ecs. (4), (8) y 9 podemos despejar

$$\phi_l^f = \frac{2\pi i}{qc} K_l a^l \quad \text{y} \quad \phi_l^d = \frac{2\pi i}{qc} K_l a^{-l}, \quad (10)$$

donde definimos el número de onda en el vacío  $q \equiv \omega/c$ . Substituyendo en la ec. (7) obtenemos el campo radial

$$E_{ri}^L(r) = \frac{2\pi i}{qrc} l K_l \times \begin{cases} -(r/a)^l, & (r < a) \\ (a/r)^l. & (r > a) \end{cases} \quad (11)$$

Ahora podemos escribir la componente del campo eléctrico longitudinal  $\mathbf{E}^L$  a lo largo de la dirección tangencial  $\hat{\boldsymbol{\theta}}$

$$E_{\theta}^L(r, \theta) = \sum_l E_{\theta l}^L(r) \cos(l\theta) \quad (12)$$

con

$$E_{\theta l}^L(r) = -\frac{2\pi i}{qrc} l K_l \times \begin{cases} (r/a)^l, & (r < a) \\ (a/r)^l. & (r > a) \end{cases} \quad (13)$$

De las ecuaciones (11) y (13) notamos que el término  $l = 0$  del campo longitudinal es nulo. Por lo tanto, la contribución más importante de este término proviene del campo transversal, que calcularemos más adelante.

Por otro lado, el campo eléctrico longitudinal  $\mathbf{E}^L(r, \theta)$  induce un campo de inducción magnética  $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = B(r, \theta)\hat{z}$  en la dirección  $z$  que cumple con la ley de Ampere-Maxwell,

$$(\nabla \times \mathbf{B}) = -iq\mathbf{E}^L, \quad (14)$$

tanto fuera como dentro del cilindro. Notamos que esta ecuación no es exacta, pues puede haber contribuciones adicionales al campo eléctrico y por tanto al campo magnético. Éstas serán discutidas más adelante. Escribiendo la inducción como

$$B(r, \theta) = \sum_l B_l(r) \cos(l\theta), \quad (15)$$

tenemos que para  $l \geq 1$

$$(\nabla \times \mathbf{B})_r = \frac{1}{r} \partial_\theta B(r, \theta) = - \sum_l \frac{l}{r} B_l(r) \sin(l\theta), \quad (16)$$

$$(\nabla \times \mathbf{B})_\theta = -\partial_r B(r, \theta) = - \sum_l \partial_r B_l(r) \cos(l\theta), \quad (17)$$

donde introdujimos las abreviatura  $\partial_r \equiv \partial/\partial r$  y  $\partial_\theta \equiv \partial/\partial \theta$ . Sustituyendo (11) y (16) en (14) obtenemos

$$B_l(r) = \frac{2\pi}{c} K_l \times \begin{cases} (r/a)^l, & (r < a) \\ -(a/r)^l, & (r > a) \end{cases} \quad (18)$$

que además cumple con la proyección tangencial de la ec. (14) y con la proporcionalidad entre la corriente superficial y la discontinuidad en la superficie  $B(a^+, \theta) - B(a^-, \theta) = -4\pi K(\theta)/c$ ,  $B_l(a^+) - B_l(a^-) = -4\pi K_l/c$ , como podríamos obtener de integrar la ley de Ampere en un pequeño circuito que atraviese la superficie del cilindro.

Recordemos que el término  $l = 0$  no contribuye al campo eléctrico longitudinal y por lo mismo no hay una corriente de desplazamiento longitudinal con  $l = 0$  y el campo de inducción correspondiente obedece simplemente la ley de Ampere con una corriente superficial homogénea como fuente, i.e., su rotacional es nulo tanto dentro como fuera del cilindro, i.e.,  $\partial_r B_0(r) = 0$  para  $r > a$  y para  $r < a$ , con soluciones constantes  $B_0(r) = B_0^f$  fuera y  $B_0(r) = B_0^d$  dentro. La discontinuidad del campo en la superficie es  $B_0^f - B_0^d = -4\pi K_0/c$ .

De acuerdo a la ley de Faraday, el campo  $\mathbf{B}$  calculado arriba induce un campo eléctrico transversal  $\mathbf{E}^T$  que obedece  $\nabla \cdot \mathbf{E}^T = 0$  y

$$(\nabla \times \mathbf{E}^T) = iq\mathbf{B}, \quad (19)$$

para el cual podemos hacer una expansión de Fourier, análoga a las ecs. (6) y (12). Para el caso  $l = 0$  la ec. (19) se convierte en

$$\frac{1}{r} \partial_r r E_{\theta 0}^{\gamma T} = iqB_0^\gamma, \quad (20)$$

con solución  $E_{\theta 0}^{\gamma T}(r) = \frac{iqB_0^{\gamma}}{2}r + c^{\gamma}/r$ , donde  $c^{\gamma}$  son constantes a determinar y  $\gamma$  indica si estamos dentro ( $\gamma = d, r < a$ ) o fuera ( $\gamma = f, r > a$ ) del cilindro. Exigiendo que  $\mathbf{E}^T$  sea finito para todo  $r$  y continuo en  $r = a$ , pues no tiene fuentes singulares, obtenemos  $B_0^f = 0, c^d = 0$  y  $c^f = \frac{iq}{2}B_0^d a^2$ , de donde  $B_0^d = 4\pi K_0/c$ ,

$$B_0(r) = \frac{4\pi}{c}K_0 \times \begin{cases} 1, & (r < a) \\ 0, & (r > a) \end{cases} \quad (21)$$

y

$$E_{\theta 0}^T(r) = \frac{2\pi iqa}{c}K_0 \times \begin{cases} r/a, & (r < a) \\ a/r, & (r > a) \end{cases} \quad (22)$$

Los términos  $l \geq 1$  de la componente transversal del campo eléctrico son más pequeños que los correspondientes términos longitudinales por un factor  $(qa)^2$  (ver apéndice A) y por tanto, en el límite de bajas frecuencias y longitud de onda larga podemos ignorar su contribución. Por lo tanto, en este límite, el campo eléctrico tangencial total  $E_{\theta}$  está dominado por el término  $l = 0$  (ec. (22)) del campo transversal y los términos  $l \geq 1$  del campo longitudinal (ec. (13)).

Hemos encontrado arriba el campo electromagnético producido en la aproximación de longitud onda larga por una corriente que circula en la superficie de un cilindro. Sin embargo, dicha corriente depende a su vez del sistema físico específico y de la forma como el mismo es excitado. Consideremos primero un cilindro metálico con un apertura de ancho angular  $2\alpha$  y excitado por un campo magnético externo oscilante dirigido a lo largo de su eje. Podemos caracterizar la apertura a través de una función escalón

$$\Theta(\theta) = \begin{cases} 1, & (-\alpha < \theta < \alpha) \\ 0, & (\text{en otro caso}) \end{cases} \quad (23)$$

Podemos expandir este escalón en una serie de Fourier

$$\Theta(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \Theta_l \cos(l\theta), \quad (24)$$

con coeficientes

$$\Theta_l = \begin{cases} \alpha/\pi, & (l = 0) \\ 2 \sin(l\alpha)/l\pi, & (l > 0) \end{cases} \quad (25)$$

La corriente eléctrica debe ser nula en el escalón,  $K(\theta)\Theta(\theta) = 0$ , condición que nos lleva a un sistema de ecuaciones acopladas para  $K_l$  (ver apéndice B)

$$\sum_m \Theta_{lm} K_m = 0 \quad (26)$$

donde  $\Theta_{lm}$  se relaciona con  $\Theta_l$  (ec. (25)) a través de

$$\Theta_{lm} = \begin{cases} \Theta_0 \delta_{0m} + \Theta_m, & (l = 0) \\ \Theta_0 \delta_{lm} + \Theta_{l+m} + \Theta_{|l-m|}, & (l \geq 1) \end{cases} \quad (27)$$

con  $\delta_{lm}$  la delta de Kronecker.

Por otro lado, el campo eléctrico tangencial total tiene tres contribuciones. Una viene del campo inducido por el campo de inducción externo,  $E_\theta^{\text{ex}}(r) = iqrB^{\text{ex}}/2$ . Otra es el campo transversal con  $l = 0$  dado por la ec. (22) y la última es el campo longitudinal con  $l \geq 1$  dado por la ec. (13). Evaluando estos tres campos en  $r = a$  obtenemos

$$E_\theta(a, \theta) = iqaB^{\text{ex}}/2 + \sum_{l=0}^{\infty} e_l K_l \cos(l\theta), \quad (28)$$

donde

$$e_l = \frac{2\pi iqa}{c} \times \begin{cases} 1, & (l = 0) \\ -l/(qa)^2, & (l \geq 1) \end{cases} \quad (29)$$

A bajas frecuencias la conductividad de un metal es muy alta, por lo cual supondremos que el cilindro está hecho de un conductor *perfecto* en cuyo interior el campo eléctrico debe anularse. La continuidad del campo eléctrico tangencial implica que éste debe ser nulo en la superficie del conductor, es decir, en todo el cilindro excepto en la apertura, condición que podemos escribir como  $E_\theta(a, \theta)(1 - \Theta(\theta)) = 0$ . Reescribimos ésta como otro sistema de ecuaciones para  $K_l$ ,

$$iqaB^{\text{ex}}(\delta_{l0} - \Theta_l) + 2e_l K_l - \sum_{m=0}^{\infty} \Theta_{lm} e_m K_m = 0. \quad (30)$$

Aprovechando la formulación obtenida arriba para un solo cilindro, es muy sencillo generalizarla para el caso de un par de cilindros concéntricos de radios  $a$  y  $b > a$ , y aperturas  $2\alpha^\zeta$  en lados opuestos del eje  $x$ , como ilustra la fig. 1, donde el índice  $\zeta$  toma los valores  $a$  y  $b$ . En cada cilindro circula una corriente superficial  $K^\zeta(\theta)$  caracterizada por sus coeficientes de Fourier  $K_l^\zeta$ . Estas corrientes producen campos eléctricos análogos a los descritos por las ecs. (13) y (22) y los cuales podemos evaluar en  $r = a, b$ , lo cual nos lleva a una ecuación análoga a la ec. (28) y que escribimos como

$$E(r = \zeta, \theta) \equiv E_\theta^\zeta(\theta) = iq\zeta B^{\text{ex}}/2 + \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{\eta=a,b} e_l^{\zeta\eta} K_l^\eta \cos(l\theta), \quad (\zeta = a, b) \quad (31)$$

donde  $e_l^{\zeta\eta}$  denota la contribución al campo en el cilindro  $\zeta$  debido a la corriente  $K_l^\eta$  que circula en el cilindro  $\eta$ , y toma los valores

$$\begin{aligned} e_0^{aa} &= \frac{2\pi iqa}{c}, & e_0^{ba} &= \frac{2\pi iqa}{c} \frac{a}{b}, & e_0^{ab} &= \frac{2\pi iqa}{c}, & e_0^{bb} &= \frac{2\pi iqb}{c} \\ e_l^{aa} &= -\frac{2\pi il}{qca}, & e_l^{ba} &= -\frac{2\pi il}{qcb} \frac{a^l}{b^l}, & e_l^{ab} &= -\frac{2\pi il}{qca} \frac{a^l}{b^l}, & e_l^{bb} &= -\frac{2\pi il}{qcb}. \end{aligned} \quad (32)$$

Caracterizamos las aperturas de ambos cilindros mediante dos funciones escalón  $\Theta^\zeta(\theta)$  que toman el valor 1 si  $\zeta = a$  y  $-\alpha^a < \theta < \alpha^a$  o si  $\zeta = b$  y  $\pi - \alpha^b < \theta < \pi + \alpha^b$ , y toman el valor 0 en otro caso. Estas funciones están caracterizadas por los coeficientes de Fourier

$$\Theta_l^\zeta = \begin{cases} \alpha^\zeta/\pi, & (l = 0) \\ 2(s^\zeta)^l \sin(l\alpha^\zeta)/l\pi, & (l \geq 1) \end{cases} \quad (33)$$

donde el signo  $s^a = +1$  y  $s^b = -1$ .

En cada apertura la corriente es nula, lo cual expresamos mediante

$$\sum_m \Theta_{lm}^\zeta K_m^\zeta = 0, \quad (34)$$

en analogía con la ecuación (26), donde

$$\Theta_{lm}^\zeta = \begin{cases} \Theta_0^\zeta \delta_{0m} + \Theta_m^\zeta, & (l = 0) \\ \Theta_0^\zeta \delta_{lm} + \Theta_{l+m}^\zeta + \Theta_{|l-m|}^\zeta, & (l \geq 1) \end{cases} \quad (35)$$

en analogía con la ec. (27). En ambos cilindros el campo eléctrico tangencial debe ser cero, lo cual expresamos mediante

$$iq\zeta B^{\text{ex}}(\delta_{l0} - \Theta_l^\zeta) + \sum_\eta 2e_l^{\zeta\eta} K_l^\eta - \sum_\eta \sum_{m=0}^{\infty} \Theta_{lm}^\zeta e_m^{\zeta\eta} K_m^\eta = 0. \quad (36)$$

en analogía con la ec. (30).

Podemos resolver los sistemas de ecuaciones (26) y (30) para el caso de un solo cilindro, o el sistema de ecuaciones (34) y (36) para el caso de dos cilindros eligiendo un *momento angular* máximo  $l, m < L_{\text{max}}$ . Entonces, las ecs. (26) y (30) serían dos sistemas de  $L_{\text{max}}$  ecuaciones con  $L_{\text{max}}$  variables  $K_m$ , mientras que las ecs. (34) y (36) serían dos sistemas de  $2L_{\text{max}}$  ecuaciones para las  $2L_{\text{max}}$  variables  $K_m^\eta$ . En ambos casos, el sistema aparentemente está sobredeterminado. Sin embargo, no todas las ecuaciones descritas arriba son linealmente independientes y el número de ecuaciones independientes corresponde al número de incógnitas, por lo que los sistemas de ecuaciones pueden ser resueltos numéricamente usando métodos como la descomposición en valores singulares (conocido como SVD por sus siglas en inglés) y  $L_{\text{max}}$  puede incrementarse hasta obtener convergencia.

Una vez obtenidos las soluciones autoconsistentes de  $K_l$ , podemos usar la definición usual del momento dipolar magnético de un circuito (corriente por área/c) para obtener el momento dipolar magnético por unidad de longitud  $m/h = \pi a^2 K_0/c$  para el caso de un cilindro o  $m/h = \pi a^2 K_0^a/c + \pi b^2 K_0^b/c$  para el caso de dos cilindros, donde  $h \rightarrow \infty$  es su altura. Para un sistema periódico con celdas unitarias 2D de área  $A$ , despreciando las interacciones entre celdas, la magnetización sería  $M = m/hA$ , de donde podemos obtener la susceptibilidad  $\chi_M = M/H = M/B^{\text{ex}}$  y la permeabilidad  $\mu = 1 + 4\pi\chi_M$ ,

$$\mu = 1 + \frac{1}{B^{\text{ex}}} \frac{4\pi}{c} \times \begin{cases} \frac{\pi a^2}{A} K_0, & (\text{un cilindro}) \\ \frac{\pi a^2}{A} K_0^a + \frac{\pi b^2}{A} K_0^b. & (\text{dos cilindros}) \end{cases} \quad (37)$$

### 3. Respuesta magnética y respuesta dieléctrica no-local

Existen dos enfoques para la descripción de las propiedades electromagnéticas de medios continuos. La más común consiste en introducir una permitividad

$\epsilon(\omega)$  y una permeabilidad  $\mu(\omega)$  que relacionan entre sí al campo eléctrico  $\mathbf{E}$  con el desplazamiento eléctrico

$$\mathbf{D}_\omega = \epsilon(\omega)\mathbf{E}_\omega \quad (38)$$

y al campo magnético  $\mathbf{H}$  con el campo de inducción magnética

$$\mathbf{B}_\omega = \mu(\omega)\mathbf{H}_\omega \quad (39)$$

para cada frecuencia  $\omega$ .

La dependencia de las funciones respuesta en  $\omega$  se conoce como dispersión temporal y es consecuencia del tiempo finito que tarda el sistema en polarizarse y magnetizarse. Es decir, al tiempo  $t$ ,  $\mathbf{D}$  y  $\mathbf{B}$  en un punto dado dependen de  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  no sólo en ese instante, sino también en tiempos anteriores  $t'$ . Esto puede apreciarse tomando la transformada de Fourier temporal de las ecuaciones anteriores y usando el teorema de la convolución,

$$\mathbf{D}(t) = \int dt' \epsilon(t-t')\mathbf{E}(t') \quad (40)$$

y

$$\mathbf{B}(t) = \int dt' \mu(t-t')\mathbf{H}(t'), \quad (41)$$

donde  $\epsilon(t-t')$  y  $\mu(t-t')$  son las transformadas de Fourier de  $\epsilon(\omega)$  y de  $\mu(\omega)$  respectivamente. En las ecuaciones previas dejamos implícita la posible dependencia de los campos y de las funciones respuesta en la posición  $\mathbf{r}$ .

Las respuestas descritas arriba pueden ser insuficientes cuando los campos varían en el espacio con una escala de distancias comparable con la microescala del sistema. En este caso, podría suceder que, por ejemplo, el desplazamiento  $\mathbf{D}(\mathbf{r})$  en una posición  $\mathbf{r}$  dependa del campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r}')$  no sólo en esa posición, sino también en otros puntos cercanos  $\mathbf{r}'$ . En este caso, es necesario generalizar la ec. (40) escribiéndola como una respuesta *no local*

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int dt' \int d\mathbf{r}' \epsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t-t')\mathbf{E}(\mathbf{r}', t'), \quad (42)$$

donde además la respuesta dieléctrica está descrita por un tensor  $\epsilon$  con componentes  $\epsilon_{ij}$ . En un medio uniforme, con simetría frente a translaciones arbitrarias, podemos reemplazar la dependencia en  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{r}'$  por una dependencia simple en la separación  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ , que podemos simplificar tomando una transformada de Fourier espacio-temporal para obtener la relación algebraica

$$\mathbf{D}_{\mathbf{k}\omega} = \epsilon(\mathbf{k}, \omega)\mathbf{E}_{\mathbf{k}\omega}. \quad (43)$$

Por lo tanto, un medio no local homogéneo puede describirse por funciones respuesta que dependen tanto de la frecuencia como del vector de onda  $\mathbf{k}$ . Por analogía con la dispersión temporal, la no localidad de las funciones respuesta se conoce también como *dispersión espacial*

La posible dependencia de la respuesta dieléctrica tanto en  $\omega$  como en  $\mathbf{k}$  nos permite incorporar en ella la respuesta magnética del sistema. Para ello

advertimos primero que es posible escribir las corrientes eléctricas asociadas a la magnetización  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{j}_m = c\nabla \times \mathbf{M} \rightarrow i\mathbf{k}c \times \mathbf{M}$  como corrientes asociadas a una polarización  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{j}_p = \partial\mathbf{P}/\partial t \rightarrow -i\omega\mathbf{P}$  si añadimos a  $\mathbf{P}$  un término de la forma  $-\mathbf{k}c \times \mathbf{M}/\omega$ , i.e.,

$$\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{P} - \mathbf{k}c \times \mathbf{M}/\omega, \quad \mathbf{M} \rightarrow \mathbf{0}. \quad (44)$$

Notamos en la ec. (44) que añadimos a la polarización un término proporcional a  $\mathbf{M}$  y por tanto proporcional a la inducción magnética, según la ec. (39). Sin embargo, la ecuación de Faraday nos muestra que la inducción es proporcional al campo eléctrico

$$\mathbf{B}_{\mathbf{k}\omega} = \mathbf{k}c \times \mathbf{E}_{\mathbf{k}\omega}/\omega. \quad (45)$$

Por lo tanto, a frecuencias finitas podemos describir completamente la respuesta del material en términos de una polarización que depende del campo eléctrico, eliminando así la permeabilidad de la descripción de la respuesta electromagnética de un material y usando exclusivamente la permitividad. El *precio* a pagar por este procedimiento es que la permitividad resultante dependería necesariamente de  $\mathbf{k}$ , como se infiere de las ecs. (44 y (45). Por lo tanto,  $\epsilon$  sería una cantidad no local. Conversamente, la dependencia de  $\epsilon$  en el vector de onda  $\mathbf{k}$  puede reinterpretarse en términos de una respuesta magnética  $\mu$ .

Por lo anterior, al calcular la respuesta macroscópica de un metamaterial fabricado de componentes no magnéticas, podemos considerar iguales a los campos  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{H}$ . De esta manera, el promedio de todas las corrientes microscópicas está incluido por completo en la definición del desplazamiento eléctrico  $\mathbf{D}$ , que se relaciona con el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  mediante el tensor dieléctrico  $\epsilon$  el cual es necesariamente no local en presencia de efectos magnéticos.

Recordemos que el metamaterial es un cristal artificial con una celda unitaria que se repite periódicamente. Cuando el tiempo que tarda la luz en recorrer una celda unitaria del metamaterial se vuelve comparable al periodo, o equivalentemente, cuando la longitud de onda es comparable al parámetro de red, los efectos no-locales se vuelven significativos. Esto puede conducir, como discutimos arriba, a una respuesta magnética efectiva, aún cuando los componentes del metamaterial no sean magnéticos [13]. Es por esta razón que resulta necesario tomar en cuenta la no-localidad en la descripción de la respuesta óptica de los metamateriales con IRN. El tensor dieléctrico no local  $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$  describe tanto la respuesta dieléctrica como la respuesta magnética del sistema[14, 15]. El límite local de la permitividad  $\epsilon(\omega)$  corresponde al límite en que el campo eléctrico varía lentamente,  $\epsilon(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}, \omega)$  del enfoque no-local. Análogamente, el límite local de la permeabilidad puede obtenerse a partir de las primeras correcciones no locales a la permitividad. En particular, puede obtenerse a partir de una expansión de  $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$  en potencias de  $\mathbf{k}$  para vectores de onda pequeños, como veremos mas adelante.

En la siguiente sección presentamos un formalismo basado en la recursión de Haydock para el cálculo de la permitividad *macroscópica*  $\epsilon_M(\mathbf{k}, \omega)$ , el cual hemos implementado en un eficiente paquete computacional que permite calcular la función dieléctricamacroscópica de metamateriales a partir de la su geometría

y de las propiedades de los materiales que los componen [16, 17, 18]. La dependencia de la respuesta dieléctrica resultante en el vector de onda nos permitirá obtener una aproximación para la permeabilidad magnética local macroscópica del sistema.

## 4. Cálculo recursivo

En esta sección desarrollaremos un esquema eficiente para el cálculo de la respuesta dieléctrica no local de metamateriales con geometrías y composiciones arbitrarias. Para ello empezamos por eliminar el campo magnético de las ecuaciones de Faraday y de Ampere-Maxwell llegando inmediatamente a una ecuación diferencial de segundo orden para el campo eléctrico  $\mathbf{E}$ ,

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \frac{4\pi i \omega}{c^2} \mathbf{J}_{\text{ex}} + \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\epsilon} \mathbf{E}, \quad (46)$$

donde  $\mathbf{J}_{\text{ex}}$  es una corriente eléctrica externa, no asociada a las corrientes de conducción, de polarización o de magnetización del sistema,  $c$  la velocidad de la luz en el vacío. Usando que el rotacional de un campo longitudinal es nulo, y que el rotacional del rotacional de un campo transversal es menos su laplaciano, podemos reescribir la ec.(46) como una ecuación de onda con fuentes,

$$\hat{\mathcal{W}} \mathbf{E} = -\frac{4\pi i}{\omega} \mathbf{J}_{\text{ex}} \quad (47)$$

donde

$$\hat{\mathcal{W}} = \left( \hat{\epsilon} + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}_T \right) \quad (48)$$

es el *operador de onda microscópico*,  $\hat{\epsilon}$  es la función dieléctrica, que toma un valor característico en cada uno de los materiales que conforman al metamaterial, por lo cual la designaremos como la *respuesta microscópica*, y la cual escribimos como un *operador lineal* por economía de notación como apreciaremos adelante,  $\hat{\mathcal{P}}_T$  es un proyector que actuando sobre un campo vectorial cualquiera  $\mathbf{F}$  nos lleva a su proyección transversal  $\mathbf{F}_T = \hat{\mathcal{P}}_T \mathbf{F}$ , y  $q = \omega/c$  es el número de onda de una onda de frecuencia  $\omega$  que se propaga libremente libre en el vacío.

Despejando formalmente al campo eléctrico de la ec. (47) obtenemos

$$\mathbf{E} = -\frac{4\pi i}{\omega} \hat{\mathcal{W}}^{-1} \mathbf{J}_{\text{ex}} \quad (49)$$

y promediando obtenemos el campo eléctrico macroscópico,

$$\mathbf{E}_M \equiv \mathbf{E}_p = -\hat{\mathcal{P}}_p \frac{4\pi i}{\omega} \hat{\mathcal{W}}^{-1} \mathbf{J}_{\text{ex}}, \quad (50)$$

donde introducimos el proyector *promedio*  $\hat{\mathcal{P}}_p$  tal que al actuar sobre un campo cualquiera  $\mathbf{F}$  produce su promedio espacial  $\mathbf{F}_p = \hat{\mathcal{P}}_p \mathbf{F}$ . En este momento no es necesario aún especificar qué entendemos por promedio. Nos basta con

cualquier operador que sea idempotente (el promedio del promedio es el promedio), que no dependa de la posición ni del tiempo para que conmute con los operadores diferenciales y que elimine de cualquier campo las fluctuaciones espaciales asociadas a la textura microscópica del metamaterial. Notamos en el lado derecho de esta ecuación que el promedio actúa sobre el producto de una constante multiplicada por un operador que actúa linealmente sobre un campo vectorial. Típicamente, el promedio de un producto no es igual al producto de los promedios, pues puede haber *fluctuaciones correlacionadas*. Sin embargo, en el extremo derecho de la ec. (50) tenemos a la corriente externa, la cual, siendo *externa*, no tiene nada que ver con la textura del metamaterial. Por lo tanto, no tiene fluctuaciones espaciales provenientes del metamaterial, y es igual a su promedio espacial,  $\mathbf{J}_{\text{ex}} = \hat{\mathcal{P}}_p \mathbf{J}_{\text{ex}}$ . De no ser así, no tendría sentido elaborar una teoría macroscópica de la respuesta a dicha corriente. Por lo tanto, podemos reescribir la ec. (50) como

$$\mathbf{E}_M = -\frac{4\pi i}{\omega} \hat{\mathcal{W}}_M^{-1} \mathbf{J}_{\text{ex}}, \quad (51)$$

donde identificamos la inversa del *operador de onda macroscópico*

$$\hat{\mathcal{W}}_M^{-1} = \hat{\mathcal{W}}_{pp}^{-1} \equiv \hat{\mathcal{P}}_p \hat{\mathcal{W}}^{-1} \hat{\mathcal{P}}_p, \quad (52)$$

empleando la idempotencia del promedio. Podemos expresar este resultado diciendo que *el inverso del operador de onda macroscópico es el promedio del inverso del operador de onda microscópico*. En analogía a la ec. (48), interpretamos al operador de onda macroscópico en términos de un operador dieléctrico macroscópico

$$\hat{\mathcal{W}}_M = \left( \hat{\epsilon}_M + \frac{1}{q^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}_T \right) \quad (53)$$

de donde podemos despejar fácilmente  $\hat{\epsilon}_M$ . En resumen, nuestro procedimiento de cálculo es partir de la respuesta dieléctrica microscópica para escribir el operador de onda microscópico, invertirlo, promediarlo, invertir el resultado y finalmente extraer la respuesta dieléctrica macroscópica.

Consideramos ahora un metamaterial binario, fabricado de dos materiales isotrópicos  $A$  y  $B$ , con permitividades  $\epsilon_a(\omega)$  y  $\epsilon_b(\omega)$  respectivamente, las cuales son funciones complejas de la frecuencia en general. Podemos entonces reescribir el operador de onda microscópico como

$$\hat{\mathcal{W}} = \frac{\epsilon_a}{u} \left( u - \hat{\mathcal{B}} \right) + \frac{\nabla^2}{q^2} \hat{\mathcal{P}}_T \quad (54)$$

donde

$$u = \frac{1}{1 - \frac{\epsilon_b}{\epsilon_a}} \quad (55)$$

es conocida como la *variable espectral*, y el operador  $\hat{\mathcal{B}}$  corresponde a la función característica  $\mathcal{B}(\mathbf{r})$  del medio  $B$ , la cual toma el valor 1 cuando la posición  $\mathbf{r}$  está en la región ocupada por el material  $B$  y toma el valor 0 en caso contrario.

Vale la pena mencionar que la variable espectral  $u(\omega)$  contiene la información sobre la composición del metamaterial y sobre la respuesta de sus componentes a distintas frecuencias  $\omega$  pero no depende de la geometría, mientras que la función característica depende únicamente de la geometría y no de la composición. Podemos reescribir al operador de onda como

$$\hat{\mathcal{W}} = \frac{\epsilon_a}{u} \left( u \hat{g}^{-1} - \hat{\mathcal{B}} \right), \quad (56)$$

donde definimos el operador

$$\hat{g} = \left( \mathbf{1} + \hat{\mathcal{P}}_T \frac{\nabla^2}{q^2 \epsilon_a} \right)^{-1}, \quad (57)$$

el cual veremos que juega el papel de una *métrica*.

Supondremos además que nuestro metamaterial es un cristal artificial con una celda unitaria que se repite periódicamente. Este cristal está caracterizado entonces por una red de Bravais  $\{\mathbf{R}\}$  y su correspondiente red recíproca  $\{\mathbf{G}\}$ , de forma tal que, de acuerdo al *teorema de Bloch*, cualquier onda plana que se propague en este cristal con algún vector de onda  $\mathbf{k}$  sería difractada, acoplándose con ondas con vectores de onda de la forma  $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ . Así, las excitaciones del sistema tendrán la forma de una *onda de Bloch*. El hecho de que la red recíproca sea *discreta* nos sugiere definir el promedio de un campo cualquiera  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  descrito por una onda de Bloch con vector de Bloch  $\mathbf{k}$ ,

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{F}_{\mathbf{k}\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \quad (58)$$

como la contribución cuyo vector de onda es  $\mathbf{k}$ ,

$$\mathbf{F}_p(\mathbf{r}) = \hat{\mathcal{P}}_P \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{F}_{\mathbf{k}\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} = \mathbf{F}_{\mathbf{k}\mathbf{0}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (59)$$

Nuestra elección de promedio descarta todos los vectores de onda  $\mathbf{k} + \mathbf{G}$  correspondientes a vectores recíprocos  $\mathbf{G} \neq \mathbf{0}$  y sólo conserva aquella componente con  $\mathbf{G} = \mathbf{0}$ . Entonces podemos representar al proyector promedio como  $\hat{\mathcal{P}}_p \rightarrow \delta_{\mathbf{G}\mathbf{0}}$  en términos de una delta de Kronecker. Una interpretación de este operador promedio es como un filtro en el espacio recíproco que sólo conserva aquellos vectores de onda en la *primera zona de Brillouin* y elimina todos los demás.

Usando el promedio anterior, podemos emplear la ec. (52) para escribir el operador de onda inverso macroscópico como

$$\hat{\mathcal{W}}_M^{-1} = \frac{u}{\epsilon_a} \hat{g}_{pp} \left( u - \hat{\mathcal{B}} \right)_{pp}^{-1}, \quad (60)$$

donde usamos el hecho de que el operador  $\hat{g}$  no mezcla distintos vectores de onda, y por tanto *conmuta* con el operador promedio. Notamos en el lado derecho de esta ecuación que contiene una expresión análoga a un operador de Green,

$$\hat{\mathcal{G}} = (\epsilon - \hat{\mathcal{H}})^{-1}, \quad (61)$$

como podría aparecer en un problema ordinario de mecánica cuántica, donde identificamos la *energía* compleja  $\epsilon$  con la variable espectral  $\epsilon \rightarrow u$  y al hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}$  con el producto  $\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \hat{\mathcal{B}}\hat{g}$ . Una objeción a la identificación anterior es que el hamiltoniano es un operador Hermitiano, mientras que el producto  $\hat{\mathcal{B}}\hat{g}$  parece no serlo. Sin embargo, este producto se vuelve hermitiano si reemplazamos el producto usual  $\langle \psi | \psi \rangle$  entre dos *vectores de estado*  $|\phi\rangle$  y  $|\psi\rangle$  por un nuevo producto *escalar*

$$(\phi|\psi) \equiv \langle \phi | \hat{g} | \psi \rangle, \quad (62)$$

en el que el operador  $\hat{g}$  juega el papel de una *métrica*. Bajo este producto escalar se verifica que

$$(\phi|\hat{\mathcal{B}}\hat{g}|\psi) = \langle \phi | \hat{g} \hat{\mathcal{B}} \hat{g} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{g} \hat{\mathcal{B}} \hat{g} | \phi \rangle^* = (\psi|\hat{\mathcal{B}}\hat{g}|\phi)^*, \quad (63)$$

por lo cual  $\hat{\mathcal{B}}\hat{g}$  *sí* es hermitiano con respecto a esta métrica.

La analogía del operador de onda macroscópico con la función de Green de problemas cuánticos simples, nos permite tomar *prestados* resultados de la mecánica cuántica para obtener la respuesta macroscópica. En particular, recurriremos a la *recursión de Haydock* [16, 17, 18]. En este método elegimos un *estado*  $|0\rangle$  inicial normalizado respecto a la métrica  $\hat{g}$  y correspondiente a una onda plana con el vector de onda  $\mathbf{k}$  y cierta polarización  $\mathbf{e}$ . A partir de  $|0\rangle$  podemos generar nuevos estados actuando recursivamente con nuestro hamiltoniano. Dados los estados  $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle \dots |n\rangle$ , generamos el estado  $|n+1\rangle$  mediante

$$|\widetilde{n+1}\rangle \equiv \hat{\mathcal{B}}\hat{g}|n\rangle = b_{n+1}|n+1\rangle + a_n|n\rangle + b_n g_n |n-1\rangle, \quad (64)$$

donde elegimos los *coeficientes de Haydock*  $a_n$  y  $b_n$  de manera que los estados  $|n\rangle$  sean *ortonormales*

$$(n|m) = \langle n | \hat{g} | m \rangle = g_n \delta_{nm} \quad (65)$$

respecto a la métrica  $\hat{g}$ , y  $g_n = \pm 1$ . Necesitamos introducir el signo  $g_n$  pues la métrica  $\hat{g}$  no es necesariamente positiva definida. Notamos que en esta base el operador  $\hat{\mathcal{B}}\hat{g}$  es tridiagonal y sus componentes se obtienen de los coeficientes de Haydock, por lo que podemos escribir

$$(u - \hat{\mathcal{B}}\hat{g}) = \begin{pmatrix} u - a_0 & -b_1 g_1 g_0 & 0 & 0 & \dots \\ -b_1 & u - a_1 & -b_2 g_2 g_1 & 0 & \dots \\ 0 & -b_2 & u - a_2 & -b_3 g_3 g_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (66)$$

De acuerdo a la ecuación (60) la respuesta macroscópica del sistema está dada en términos del promedio, que identificamos como el elemento 00, de la inversa de esta matriz. Este elemento se puede obtener en forma de la fracción continuada

$$\mathbf{e} \cdot \mathcal{W}_M^{-1} \cdot \mathbf{e} = \frac{u}{\epsilon_A} \frac{g_0 b_0^2}{u - a_0 - \frac{g_0 g_1 b_1^2}{u - a_1 - \frac{g_1 g_2 b_2^2}{u - a_2 - \frac{g_2 g_3 b_3^2}{\ddots}}}} \quad (67)$$

Los coeficientes de Haydock que aparecen en (67) provienen de la aplicación reiterada de la función característica, que depende exclusivamente de la geometría, y de la métrica, la cual tiene una dependencia trivial en el número de onda  $k_a = \sqrt{\epsilon_a}q$  de las ondas libres en el medio  $A$ . Para cada valor de  $k_a$ , que a su vez corresponde a un valor del número de onda libre  $q = \omega/c$ , la dependencia en los componentes del metamaterial y su respuesta dinámica está contenida únicamente en la variable espectral  $u$ . De la ec. (67) obtenemos la proyección del operador de onda macroscópico  $\mathcal{W}_M^{-1}$  a lo largo del vector de polarización  $\mathbf{e}$ . Repitiendo el cálculo anterior para suficientes direcciones  $\mathbf{e}$  independientes, podemos encontrar todas las componentes de  $\mathcal{W}_M^{-1}$ , el cual podemos interpretar como un tensor cartesiano para cada valor de la frecuencia y del vector de onda  $\mathbf{k}$ . A continuación podemos invertir este tensor para finalmente obtener el tensor dieléctrico macroscópico

$$\epsilon_M(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{q^2}(k^2\mathbf{1} - \mathbf{k}\mathbf{k}) + \mathcal{W}^M(\mathbf{k}, \omega). \quad (68)$$

El método descrito anteriormente ha sido implementado en un paquete computacional que emplea el expresivo lenguaje *PERL* y su eficiente extensión numérica *Perl Data Language* [19, 20] y ha sido codificado como un sistema de objetos en un paquete llamado *Photonic* que actualmente se encuentra disponible al público [21]. El elemento central en el cálculo es la función característica  $\mathcal{B}(\mathbf{r})$  la cual describe la geometría de la celda unitaria y la cual se puede representar como un arreglo  $D$ -dimensional de unos y ceros, donde 1 corresponde a los pixeles o voxeles ocupados por el material  $B$  y los ceros a aquellos ocupados por el material  $A$ .

Es importante notar que la métrica incluye al operador laplaciano, que en la representación del espacio recíproco, donde los estados  $|\psi\rangle$  son representados como una suma de ondas planas, corresponde a  $\nabla^2 \rightarrow -|\mathbf{k} + \mathbf{G}|^2$ . Por lo tanto, la respuesta dieléctrica obtenida en este esquema es no local. La dispersión espacial se manifiesta a través de la dependencia en el vector de onda  $\mathbf{k}$  adicional a la dependencia en la frecuencia  $\omega$ , como se observa explícitamente en la ec. (68). De nuestro cálculo no local podríamos obtener una respuesta dieléctrica local tomando el límite de longitudes de onda largas, vectores de onda pequeños,

$$\epsilon_M(\omega) = \epsilon_M(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}, \omega). \quad (69)$$

Sin embargo, este límite local es insuficiente para el cálculo de propiedades ópticas, pues la relación de dispersión electromagnética en un material es cuadrática en el vector de onda. Por lo tanto, es indispensable aproximar la respuesta dieléctrica al menos hasta el orden cuadrático en potencias de  $\mathbf{k}$ . De esta expansión es posible obtener, a un primer orden de aproximación, la respuesta magnética local asociada a la dispersión espacial de  $\epsilon$  como veremos a continuación.

La forma más sencilla de hallar la permeabilidad magnética correspondiente se sigue de la relación de dispersión de las ondas electromagnéticas transversales a lo largo de los ejes de simetría y para campos polarizados a lo largo de direcciones principales. Llamando  $\epsilon_M(k, \omega)$  al valor principal correspondiente

de  $\epsilon_M$  y habiendo fijado la dirección de  $\mathbf{k}$ , la relación de dispersión se sigue inmediatamente de la ecuación de onda y es

$$k^2 = \epsilon_M(k, \omega) q^2. \quad (70)$$

Haciendo una expansión de Taylor hasta orden cuadrático,

$$k^2 = \left( \epsilon_M(0, \omega) + \frac{1}{2} k^2 \frac{\partial^2}{\partial k^2} \epsilon_M(k, \omega) \Big|_{k=0} \right) q^2, \quad (71)$$

donde hemos eliminado el término lineal en  $k$  suponiendo que el sistema es invariante frente a inversiones temporales  $t \rightarrow -t$ ,  $k \rightarrow -k$ . Despejando  $k^2$  de esta ecuación, podemos reescribirla para obtener la forma convencional de la relación de dispersión

$$k^2 = \epsilon_M(\omega) \mu_M(\omega) q^2, \quad (72)$$

donde identificamos la permeabilidad magnética como

$$\mu_M(\omega) = \frac{1}{1 - q^2 \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \epsilon_M(k, \omega) \Big|_{k \rightarrow 0}}. \quad (73)$$

En resumen, hemos mostrado un esquema que nos permite calcular la permitividad y la permeabilidad locales macroscópicas de un metamaterial binario con una composición y geometría arbitrarias en el límite de longitud larga. Para esto, obtenemos primero la respuesta dieléctrica no local usando un formalismo numérico como el método de Haydock presentado en esta sección, y posteriormente tomando su límite local y calculando su segunda derivada respecto al vector de onda con la cual encontramos una expresión aproximada para la permeabilidad magnética del sistema.

## 5. Resultados

Como un primer cálculo para probar el formalismo de la sección anterior, consideremos una red cuadrada con parámetro de red  $d$  de cilindros conductores huecos sumergidos en el espacio vacío sin apertura, con un radio exterior  $a = 0.5d$  y un radio interior  $0.1d$ .

De acuerdo a nuestro modelo simple para conductores perfectos, (sección 2) cuando los cilindros no tienen aperturas (el ángulo  $\alpha = 0$  en la Ec. (23)) las ecs. (26) desaparecen y las ecs. (30) conducen a  $K_0 = -iqaB^{\text{ex}}/2e_0$  y  $K_l = 0$  para  $l \geq 1$ , por lo cual la Ec. (37) lleva al resultado simple  $\mu = 1 - f$ , donde  $f = \pi a^2/d^2$  es la fracción de llenado de la región encerrada por la superficie exterior de los cilindros.

Utilizando el formalismo presentado en la sección anterior realizamos cálculos numéricos de la permitividad no-local macroscópica  $\epsilon_M$  de dicho metamaterial asignándole diferentes permitividades  $\epsilon_a$  a los conductores. Recordemos que a bajas frecuencias  $\epsilon_a$  es vuelve negativa y de mayor tamaño mientras mejor es el conductor.

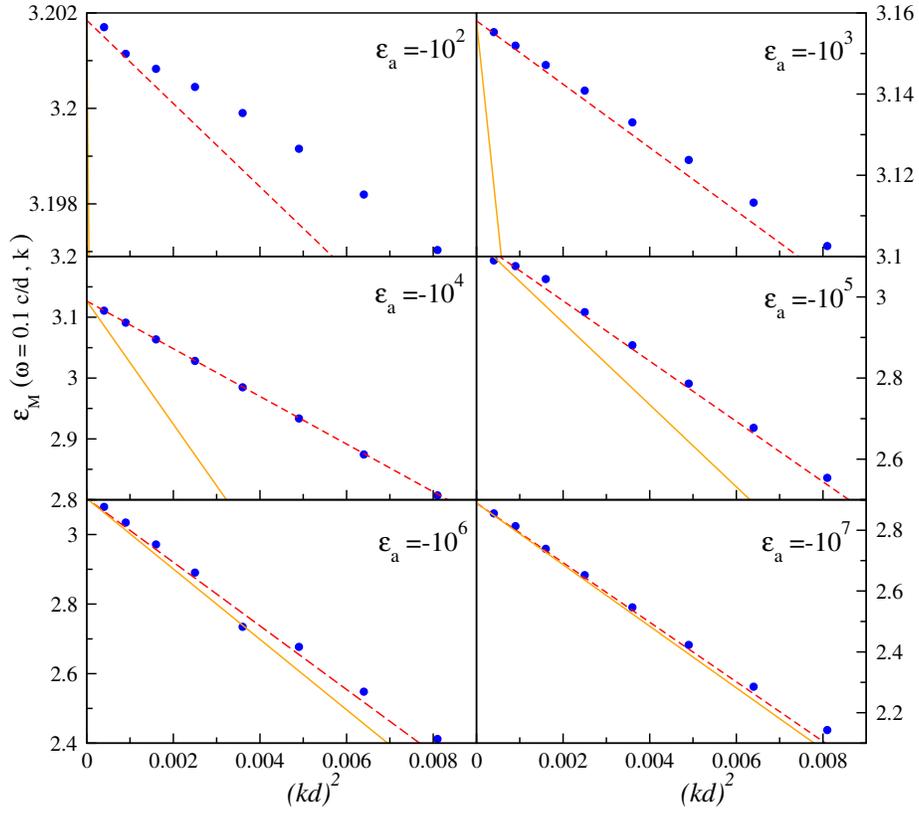


Figura 2: Permitividad eléctrica  $\epsilon_M$  a frecuencia  $\omega = 0.1c/d$  obtenida numéricamente (círculos) y analíticamente (línea punteada), como función del cuadrado  $k^2$  del vector de onda, para una red cuadrada de cilindros metálicos huecos con radio exterior  $0.4d$  y radio interior  $0.1d$ , correspondiente a una llenado (exterior)  $f = 0.5$ , donde  $d$  es el parámetro de red. La línea continua muestra el límite para un conductor perfecto. Los resultados se muestran para diferentes valores de la permitividad eléctrica del metal como se indica en el interior de cada recuadro.

También llevamos a cabo un cálculo analítico resolviendo la ecuación de Helmholtz para el campo magnético en la región metálica y empatándolo con un campo magnético que no depende de la posición en la región del vacío, donde suponemos vale la aproximación de longitud de onda larga.

La figura 2 muestra los resultados de la componente transversal del tensor de permitividad  $\epsilon_M$  no local a frecuencia  $\omega = qc$  con  $q = 0.1/d$  como función del cuadrado  $k^2$  del vector de onda para una red cuadrada de cilindros metálicos huecos con radio interior  $0.1d$  y radio exterior  $a = .4d$ , correspondiente a la fracción de llenado  $f \approx 0.5$ . Si el conductor fuera perfecto la distancia de penetración del campo sería cero y el ancho de las paredes sería irrelevante, el resultado dependería exclusivamente del radio exterior de los cilindros. En la figura mostramos los resultados que esperaríamos para un cilindro conductor perfecto,  $\mu = 1 - f$  y los resultados del cálculo analítico en la aproximación de longitud de onda larga.

Para una permitividad  $\epsilon_a$  negativa, cuyo tamaño es del orden de  $10^2$ , la aproximación analítica no describe satisfactoriamente las correcciones no locales a la respuesta macroscópica del sistema, pues la permitividad del cilindro es sólo dos órdenes de magnitud mayor que la del vacío, por lo que la distancia de penetración del campo en el cilindro es apenas un orden de magnitud menor que la longitud de onda en el vacío. Esto es consistente con la discrepancia que muestra la fig. 2 entre el resultado analítico y el resultado numérico. La discrepancia con el modelo de conductor perfecto es aún mayor. Sin embargo, para permitividades metálicas con valor absoluto del orden  $10^3$  o mayor, los resultados numéricos tienen un excelente acuerdo con los del modelo analítico. Finalmente, observamos también, que al aumentar aún más la permitividad de los cilindros metálicos, cuando alcanza valores del orden  $10^7$  o mayores, obtenemos finalmente un acuerdo con el resultado esperado para conductores perfectos. Resultados similares se obtuvieron para otras fracciones de llenado de los cilindros. Sin embargo, en nuestro modelo numérico no podemos llegar a valores mucho mayores de  $\epsilon_a$  por dificultades de convergencia. Recordemos que el cálculo numérico inicia a partir de la función característica  $\mathcal{B}(\mathbf{r})$  que representamos como un arreglo de píxeles o voxeles. No podemos esperar que el método numérico funcione cuando la distancia de penetración del campo sea menor a un pixel, pues sería imposible representar dicho decaimiento con un arreglo discreto. Por lo tanto, al aumentar el valor absoluto de  $\epsilon_a$  es necesario aumentar el tamaño de nuestros arreglos, con el consecuente aumento del tiempo de cómputo.

El hecho de que para este sistema los resultados numéricos coincidieran con los resultados de aproximaciones simples en aquellas regiones donde esperamos que las mismas sean válidas, sugieren que la permeabilidad magnética a bajas frecuencias sí está bien descrita por la dependencia en el vector de onda de la permeabilidad macroscópica no local.

Habiendo verificado la eficiencia y las limitaciones de nuestro método con un metamaterial muy sencillo, podemos proceder a analizar la respuesta magnética de un metamaterial más interesante, que permita obtener resonancias y valores negativos de la permeabilidad. En particular, sería importante investigar la geometría del tipo *split-ring* que analizamos en la sección 2, con el finde

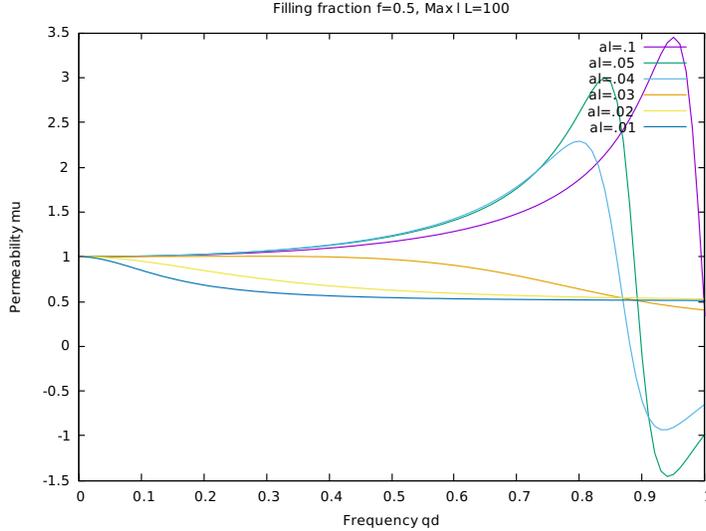


Figura 3: Permeabilidad magnética  $\mu$  de una red cuadrada de cilindros conductores perfectos de radio  $a = 0.4d$  y fracción de llenado  $f \approx 0.5$  para distintas semiaperturas angulares  $\alpha$  entre 0.01 y 0.1. El cálculo fue realizado con  $L_{\max} = 100$  valores para el momento angular  $l$ .

comparar nuestros resultados y valorar la posibilidad de aplicar nuestro método en geometrías aún mas complejas.

Como un primer paso, exploraremos la respuesta de una red de cilindros conductores perfectos interrumpidos mediante una apertura de ancho angular  $2\alpha$  empleando el formalismo de la sección 2. La fig. 3 muestra la permitividad como función de la frecuencia para diversos valores de  $\alpha$ . Vemos que para  $\alpha = 0.1$  se ve claramente una resonancia tras de la cual la permeabilidad toma valores negativos. Sin embargo, dicha resonancia aparece a una frecuencia  $qd = \omega d/c$  muy cercana a 1, por lo cual no está justificada la aproximación de longitud de onda larga. Intentamos recorrer la resonancia a frecuencias menores cerrando la brecha. Si bien para  $\alpha = 0.05$  y  $\alpha = 0.04$  la frecuencia de la resonancia disminuye, lo hace muy ligeramente. Para  $\alpha$  más pequeña, la resonancia aparentemente desaparece.

Un análisis más cuidadoso nos hace ver que aperturas tan pequeñas como 0.01-0.03 difícilmente pueden representarse mediante una serie de Fourier (24) truncada con un valor tan pequeña de  $L_{\max}$ . El *principio de incertidumbre* nos sugeriría que  $L_{\max}$  debe ser mayor a  $1/2\alpha$ . Para verificar ésto, en la fig. 4 repetimos el cálculo anterior para una apertura pequeña pero para distintos valores de  $L_{\max}$ . Observamos que al aumentar  $L_{\max}$ , reaparece la resonancia que habíamos perdido al cerrar la apertura. Sin embargo, la posición de la resonancia sigue siendo muy alta, a pesar de que escogimos una apertura tan pequeña que difícilmente podría realizarse experimentalmente.

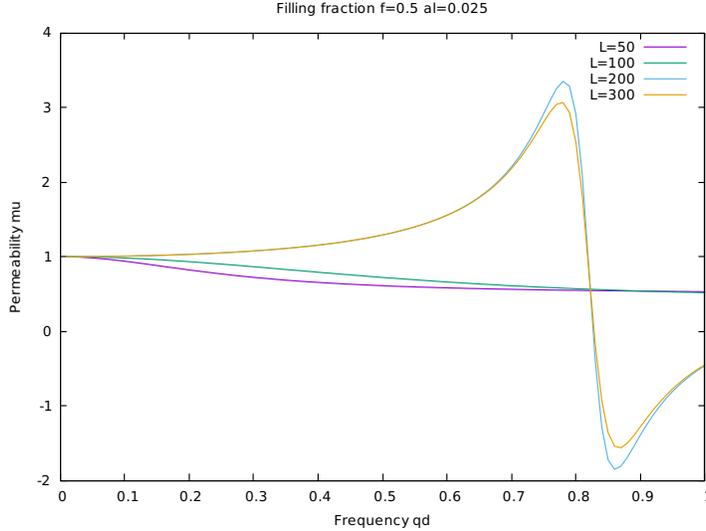


Figura 4: Permeabilidad magnética  $\mu$  de una red cuadrada de cilindros conductores como los de la figura 3 con una semiapertura  $\alpha = 0.025$  pero calculado con distintos valores de  $L_{\max}$  entre 50 y 300.

Podemos entender el problema con los sistemas recién explorados si los visualizamos como unos circuitos LC. La capacitancia proviene de la brecha, pero como nuestros cilindros son infinitamente delgados, dicha capacitancia es muy pequeña y por tanto la resonancia  $1/\sqrt{LC}$  corresponde a una frecuencia tan alta que las aproximaciones no son válidas. Para incrementar la capacitancia y contar con más parámetros que permitan entonar la resonancia es que se ha recurrido a cilindros dobles con aperturas, como los ilustrados en la fig. 1. Como muestra la fig. 5 con aperturas relativamente anchas podemos obtener resonancias bien desarrolladas y entonarlas hacia valores bajos de la frecuencia donde las aproximaciones realizadas conducen a errores pequeños.

Finalmente, en la figura 6 mostramos el resultado de nuestro cálculo numérico no local para una red de cilindros dobles abiertos. Para hacer el cálculo numérico obtuvimos para cada frecuencia la componente transversal del tensor de permitividad  $\epsilon_M$  como función del cuadrado  $k^2$  del vector de onda, ajustamos una recta al resultado y obtuvimos la permeabilidad  $\mu_M$  usando la ec. (73). Tal como esperábamos tras analizar la fig. 5, obtuvimos una resonancia en la permeabilidad a frecuencias no demasiado altas arriba de la cual toma valores negativos. Como una referencia, también mostramos en la figura los resultados del modelo simple. Como la distancia de penetración del campo en un metal a bajas frecuencias es muy pequeña, empleamos el radio mayor del cilindro interior y el radio menor del cilindro exterior como los radios  $a$  y  $b$  que aparecen en dicho modelo. El acuerdo cualitativo entre los resultados de ambos modelos es muy bueno, aunque su frecuencia de resonancia no es idéntica. Esto se debe a que en

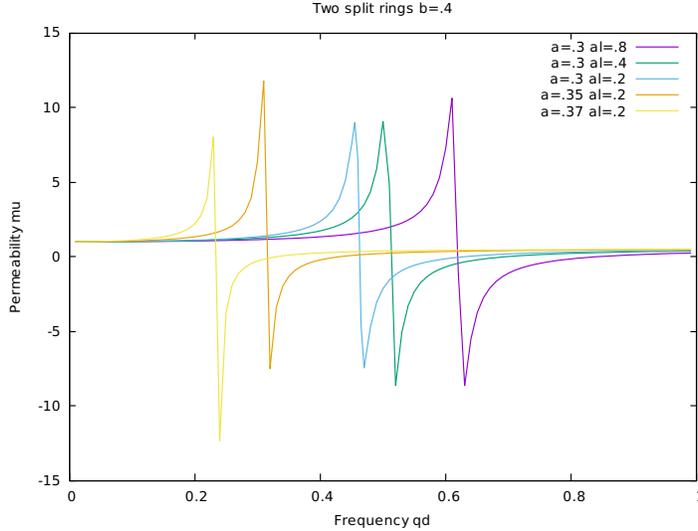


Figura 5: Permeabilidad magnética  $\mu$  de una red cuadrada de cilindros conductores dobles con radio  $b = 0.4d$  y distintos valores del radio  $a$  y entre  $0.3d$  y  $0.37d$  y semiaperturas  $\alpha = \beta$  entre 0.2 y 0.8.

el modelo numérico no podemos alcanzar el límite de un conductor perfecto ni podemos hacer que su ancho se anule, por lo que la respuesta microscópica y la geometría no son idénticas entre ambos modelos.

Notamos en las figs. 3-6 que a bajas frecuencias la permitividad  $\mu_M \approx 1$ , pues los anillos abiertos no pueden sostener una corriente DC, mientras que a altas frecuencias  $\mu \approx 1 - f$  pues los capacitores se comportan como circuitos cerrados y los anillos se comportan como si no tuvieran aperturas.

Encontramos entonces un rango de frecuencias entonable en el cual la permeabilidad es negativa y sería posible construir un metamaterial izquierdo, siempre y cuando logremos al mismo tiempo una permitividad eléctrica negativa. Esto se puede lograr combinando el sistema que analizamos arriba con una malla de alambres metálicos muy delgados que hagan que el sistema se comporte macroscópicamente como un mal conductor.

## 6. Conclusiones

Hemos presentado un método simple para el cálculo de la respuesta magnética macroscópica de metamateriales que contienen fases conductoras perfectas con geometrías muy sencillas y un método que permite el cálculo de la respuesta dieléctrica no local de metamateriales de geometría y composición arbitraria. Asimismo, hemos mostrado cómo relacionar la no localidad de la respuesta dieléctrica con la respuesta magnética. Hemos aplicado ambos métodos a sistemas

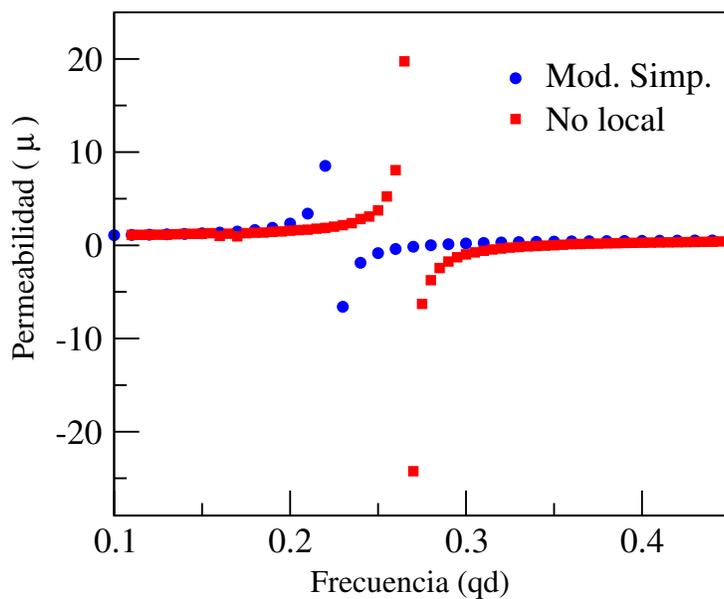


Figura 6: Permeabilidad magnética  $\mu$  calculada numéricamente para una red cuadrada de parejas de cilindros conductores abiertos. Un cilindro de cada pareja tiene radio interior  $0.26d$  y radio exterior  $a = 0.32d$ . El otro tiene radio interior  $b = 0.34d$  y radio exterior  $0.4d$ . La apertura corresponde a una separación  $0.06d$ . La permitividad de los metales se tomó como  $\epsilon_a = -10^4$ . También se muestran los resultados del modelo simple para parejas de cilindros conductores perfectos con paredes infinitamente delgadas y radios  $a$  y  $b$  con la misma apertura.

simples y hemos comparado los resultados, lo cual nos permite concluir que el cálculo de la respuesta magnética a partir de la no localidad es viable y conduce a buenos resultados, con la ventaja de ser un método aplicable a geometrías variadas y complejas y permite atacar sistemas realistas fabricados con materiales dispersivos y disipativos.

## Agradecimientos

Este trabajo se realizó con apoyo de DGAPA-UNAM a través de una beca postdoctoral para LJ y del proyecto IN113016.

## A. Apéndice: Campo transversal

La corriente eléctrica (1) y el campo eléctrico longitudinal ((12) y (13)) producido por la correspondiente acumulación de carga da lugar a una inducción magnética  $\mathbf{B}$  ((18) y (21)) en la dirección  $z$  que a su vez da origen a un campo eléctrico transversal que cumple la ec. (19). Expandemos las componentes radiales y tangenciales de este campo de manera análoga a la mostrada en las ecs. (6) y (12) definiendo así contribuciones  $E_{rl}^T(r)$  y  $E_{\theta l}^T(r)$  para cada  $l$ . Podemos entonces reescribir la Ec. (19) para  $l \geq 1$  como

$$\frac{1}{r}(\partial_r r E_{\theta l}^T(r) - l E_{rl}^T(r)) = \frac{2\pi i q}{c} K_l \times \begin{cases} (r/a)^l, & (r < a) \\ -(a/r)^l, & (r > a) \end{cases} \quad (74)$$

Dado que  $\mathbf{E}^T$  es un campo transversal, cumple con  $\nabla \cdot \mathbf{E}^T = 0$ , lo cual reescribimos como

$$\partial_r r E_{rl}^T(r) = l E_{\theta l}^T(r), \quad (75)$$

que usamos para eliminar  $E_{\theta l}^T(r)$  de la ec. (74) y obtener

$$\partial_r r \partial_r r E_{rl}^T(r) - l^2 E_{rl}^T(r) = \frac{2\pi i q}{c} l K_l r \times \begin{cases} (a/r)^l, & (r < a) \\ -(a/r)^l, & (r > a) \end{cases} \quad (76)$$

con una solución particular de la forma

$$E_{rl}^T(r) = \begin{cases} E_r^d r^{l+1}, & (r < a) \\ E_r^f r^{-l+1}, & (r > a) \end{cases} \quad (77)$$

Sustituyendo la ec. (77) en (76) obtenemos el campo radial

$$E_{rl}^T(r) = \frac{i\pi q r}{2c} l K_l \times \begin{cases} (r/a)^l / (l+1), & (r < a) \\ (a/r)^l / (l-1), & (r > a) \end{cases} \quad (78)$$

válida sólo para  $l \geq 2$  (los casos  $l = 0, 1$  se discutirán más adelante). Sustituyendo en la ec. (75) obtenemos el campo tangencial

$$E_{\theta l}^T(r) = \frac{i\pi q r}{2c} K_l \times \begin{cases} (r/a)^l (l+2)/(l+1), & r < a \\ -(a/r)^l (l-2)/(l-1), & r > a \end{cases} \quad (79)$$

Debemos añadir a las soluciones particulares (78) y (79) de las ecs. (74) y (75) las soluciones de las correspondientes ecuaciones homogéneas, proporcionales a  $r^{-l-1}$  y a  $r^{l-1}$  para  $r > a$  y  $r < a$  respectivamente. Los coeficientes de estos términos se obtienen de imponer condiciones de continuidad en  $r = a$  y conducen a la solución final

$$E_{rl}^T(r) = \frac{i\pi qr}{2c} \frac{K_l}{l^2 - 1} \times \begin{cases} (r/a)^l(l(l-1) - (l-2)(l+1)(a/r)^2), & (r < a) \\ (a/r)^l(l(l+1) - (l+2)(l-1)(a/r)^2), & (r > a) \end{cases} \quad (80)$$

y

$$E_{\theta l}^T(r) = \frac{i\pi qr}{2c} \frac{K_l}{l^2 - 1} \times \begin{cases} (r/a)^l((l+2)(l-1) - (l-2)(l+1)(a/r)^2), & (r < a) \\ -(a/r)^l((l-2)(l+1) - (l+2)(l-1)(a/r)^2), & (r > a) \end{cases} \quad (81)$$

para  $l \geq 2$ .

Evaluando estas expresiones en  $r = a$  y comparándolas con el campo longitudinal (11) y (13) observamos que el campo transversal es del orden de  $(qa)^2$  veces más pequeño. Por lo tanto, en el límite de longitud de onda larga podemos despreciar al campo eléctrico transversal comparado el campo eléctrico longitudinal.

Para  $l = 1$  y  $r < a$  las soluciones (80) y (81) no son válidas. Sin embargo, podemos seguir un procedimiento similar al anterior para resolver las ecs. (74) y (75) para hallar

$$E_{r1}^T(r) = -\frac{i\pi qa}{4c} K_1 \times \begin{cases} -(r/a)^2, & (r < a) \\ 4(\log(r/a) - 1) + 3(a/r)^2, & (r > a) \end{cases} \quad (82)$$

y

$$E_{\theta 1}^T(r) = -\frac{i\pi qa}{4c} K_1 \times \begin{cases} -3(r/a)^2, & (r < a) \\ 4\log(r/a) - 3(a/r)^2, & (r > a) \end{cases} \quad (83)$$

Notamos que ahora aparece un término que diverge cuando  $r \rightarrow \infty$ , aunque muy lentamente, por lo cual no afectaría los cálculos en un metamaterial con una celda unitaria finita. A esta solución se le puede añadir un campo constante sin afectar ni las ecuaciones diferenciales ni las condiciones de continuidad. Al igual que los casos con  $l \geq 2$ , el campo transversal con  $l = 1$  evaluado en la superficie  $r = a$  del cilindro es  $(qa)^2$  veces menor que el correspondiente término longitudinal y es por tanto despreciable en el límite de longitud de onda larga.

Finalmente, en el caso  $l = 0$  no hay campo longitudinal y el campo transversal fue evaluado explícitamente en el texto, ec. (22).

## B. Apéndice: Función escalón

Expandiendo en cosenos la función escalón (23), (24) y la corriente superficial (1), podemos expresar el hecho de que la corriente no fluye en la apertura  $\Theta(\theta)K(\theta) = 0$  como

$$0 = \frac{1}{2} \sum_{n,m=0}^{\infty} \Theta_n K_m \cos((n+m)\theta) + \frac{1}{2} \sum_{n,m=0}^{\infty} \cos((n-m)\theta). \quad (84)$$

usando identidades trigonométricas para el producto de cosenos. Podemos reescribir la primera suma como

$$\sum_{n,m=0}^{\infty} \Theta_n K_m \cos((n+m)\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l \Theta_{l-m} K_m \cos(l\theta) \quad (85)$$

introduciendo el índice  $l = n + m$ . Para la segunda suma de la ec. (84) podemos tratar por separado los casos  $n > m$ ,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{n-1} \Theta_n K_m \cos((n-m)\theta) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \Theta_{l+m} K_m \cos(l\theta), \quad (86)$$

$n = m$ ,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=n}^n \Theta_n K_m \cos((n-m)\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_n K_n, \quad (87)$$

y  $n < m$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=n+1}^{\infty} \Theta_n K_m \cos((n-m)\theta) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=l}^{\infty} \Theta_{m-l} K_m \cos(l\theta), \quad (88)$$

donde hicimos los cambios de variable  $l = n - m$ ,  $l = 0$  y  $l = m - n$  respectivamente. Sustituyendo las ecs. (85)-(88) en la ec. (84) y usando la independencia lineal de las funciones trigonométricas  $\cos l\theta$ ,  $l = 0, 1, 2 \dots$  podemos reescribir la Ec. (84) como un sistema de ecuaciones

$$0 = \sum_{m=0}^{\infty} \Theta_{lm} K_m, \quad (l = 0, 1, 2 \dots) \quad (89)$$

donde la *matriz*  $\Theta_{lm}$  se relaciona con los coeficientes de Fourier  $\Theta_l$  de  $\Theta(\theta)$  mediante la ec. (27). Este resultado es la versión para series de cosenos del conocido *teorema de la convolución*.

## Referencias

- [1] David R Smith, John B Pendry, and Mike CK Wiltshire. Metamaterials and negative refractive index. *Science*, 305(5685):788–792, 2004.
- [2] Richard A Shelby, David R Smith, and Seldon Schultz. Experimental verification of a negative index of refraction. *Science*, 292(5514):77–79, 2001.
- [3] D. R. Smith, Willie J. Padilla, D. C. Vier, S. C. Nemat-Nasser, and S. Schultz. Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity. *Phys. Rev. Lett.*, 84:4184–4187, May 2000.
- [4] Viktor G Veselago. The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of  $\epsilon$  and  $\mu$ . *Soviet physics uspekhi*, 10(4):509, 1968.

- [5] David R. Smith and Norman Kroll. Negative refractive index in left-handed materials. *Phys. Rev. Lett.*, 85:2933–2936, Oct 2000.
- [6] J. B. Pendry. Negative refraction makes a perfect lens. *Phys. Rev. Lett.*, 85:3966–3969, Oct 2000.
- [7] Dylan Lu and Zhaowei Liu. Hyperlenses and metalenses for far-field super-resolution imaging. *Nature Communications*, 3:1205, 2012.
- [8] S O’Brien and JB Pendry. Magnetic activity at infrared frequencies in structured metallic photonic crystals. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(25):6383, 2002.
- [9] John B Pendry, A J\_ Holden, DJ Robbins, and WJ Stewart. Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 47(11):2075–2084, 1999.
- [10] Koray Aydin, Irfan Bulu, Kaan Guven, Maria Kafesaki, Costas M Soukoulis, and Ekmel Ozbay. Investigation of magnetic resonances for different split-ring resonator parameters and designs. *New Journal of Physics*, 7(1):168, 2005.
- [11] R. A. Shelby, D. R. Smith, and S. Schultz. Experimental verification of a negative index of refraction. *Science*, 292(5514):77–79, 2001.
- [12] Stefan Linden, Christian Enkrich, Martin Wegener, Jiangfeng Zhou, Thomas Koschny, and Costas M. Soukoulis. Magnetic response of metamaterials at 100 terahertz. *Science*, 306(5700):1351–1353, 2004.
- [13] Bruno Gompf, Barbara Krausz, Bettina Frank, and Martin Dressel. k-dependent optics of nanostructures: Spatial dispersion of metallic nanorings and split-ring resonators. *Physical Review B*, 86(7):075462, 2012.
- [14] Vladimir M Agranovich and Yu N Gartsstein. Spatial dispersion and negative refraction of light. *Physics-Uspekhi*, 49(10):1029, 2006.
- [15] VM Agranovich and Yu N Gartsstein. Electrodynamics of metamaterials and the landau–lifshitz approach to the magnetic permeability. *Metamaterials*, 3(1):1–9, 2009.
- [16] W Luis Mochán, Guillermo P Ortiz, and Bernardo S Mendoza. Efficient homogenization procedure for the calculation of optical properties of 3d nanostructured composites. *Optics Express*, 18(21):22119–22127, 2010.
- [17] Bernardo S Mendoza and W Luis Mochán. Birefringent nanostructured composite materials. *Physical Review B*, 85(12):125418, 2012.
- [18] Ernesto Cortés, Luis Mochán, Bernardo S Mendoza, and Guillermo P Ortiz. Optical properties of nanostructured metamaterials. *Physica Status Solidi (b)*, 247(8):2102–2107, 2010.

- [19] K. Glazebrook and F. Economou, *Pdl: The perl data language*, Dr. Dobb's Journal.
- [20] K. Glazebrook and J. Brinchmann and J. Cerney and C. DeForest and D. Hunt and T. Jenness and T. Luka and R. Schwebel and C. Soeller, *The perl data language v2.4.4*.
- [21] W. Luis Mochán, Guillermo Ortiz, Bernardo S. Mendoza, and José Samuel Pérez-Huerta. Photonic. Comprehensive Perl Archive Network (CPAN), 2016. Perl package for calculations on metamaterials and photonic structures.

# Fricción dinámica: historia y resultados recientes

Frédéric S. Masset, Instituto de Ciencias Físicas, UNAM

## 1. Introducción

El concepto de fricción dinámica fue originalmente introducido por [2], quien consideró la deceleración que experimenta una estrella u otro cuerpo masivo que viaja a cierta velocidad con respecto al conjunto de un gran número de estrellas. Una formulación muy simplificada de la fórmula de Chandrasekhar para la fricción dinámica puede obtenerse asumiendo que las vecinas están fijas, y de masa  $m$  mucho menor a la masa  $M$  de la estrella E que atraviesa el medio. El intercambio de momento lineal entre la estrella E y el enjambre de estrellas que atraviesa puede estimarse calculando el intercambio de momento durante el encuentro cercano entre E y otra estrella, posteriormente integrando sobre el conjunto de estrellas. Se trata de un cálculo clásico, que reproducimos a continuación.

Describimos el encuentro cercano entre la estrella E (sobre la cual se ejerce *in fine* la fuerza de fricción dinámica que pretendemos evaluar) y una estrella vecina V. Nos colocamos en el referencial centrado sobre E, que asemejamos al referencial del centro de masa ya que  $M \gg m$ , y nos preguntamos cual es la trayectoria de la estrella V en este referencial. Nuestra aproximación  $m \ll M$  nos permite decir que la masa total del sistema es aproximadamente  $M$ , mientras que la masa reducida es aproximadamente  $m$ . Se trata de un problema de fuerza central, en el cual la trayectoria no está aco-

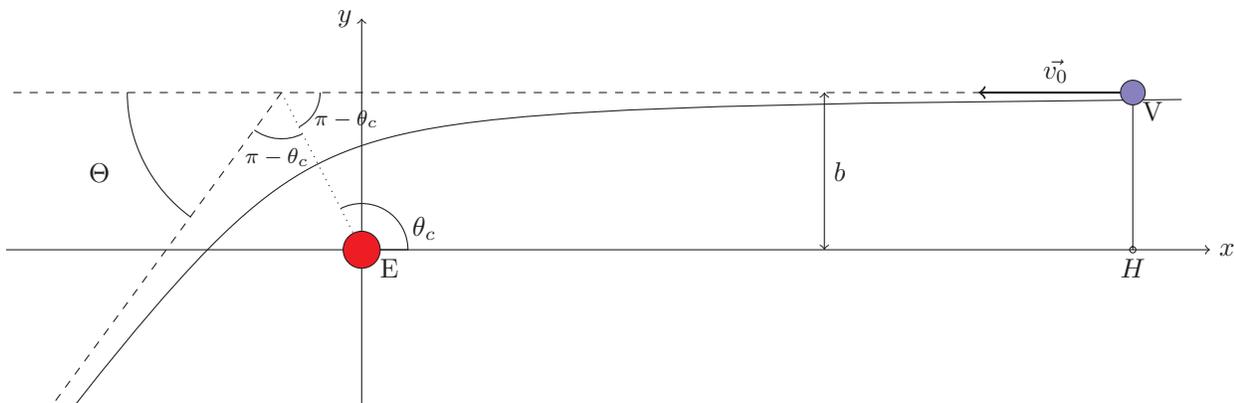


Figura 1: Representación gráfica del encuentro cercano mencionado en el texto. La estrella E de masa  $M$  está en el origen (color rojo en la versión electrónica), y la vecina V (color azul en la versión electrónica) tiene inicialmente una trayectoria horizontal de velocidad  $v_0$  en el referencial amarrado a E.

tada y en el cual la estrella V tiene una velocidad finita a gran distancia del origen. La energía total del sistema es entonces positiva y por ende la trayectoria es una hipérbola. Nos preguntamos cual es el momento lineal en la dirección  $x$  perdido por la estrella V durante el encuentro. Por virtud de la ley de acción y reacción, este momento está ganado por la estrella E. De este intercambio de momento

proviene la fricción dinámica. La conservación de la energía total de la estrella V (y por ende de su energía cinética entre  $t \rightarrow -\infty$  y  $t \rightarrow +\infty$  ya que la energía potencial se vuelve despreciable fuera del encuentro cercano) implica que solamente necesitamos obtener el ángulo  $\Theta$  para contestar esta pregunta. La ecuación polar de la trayectoria es:

$$r = \frac{a(1 - e^2)}{1 + e \cos(\theta - \theta_c)}, \quad (1)$$

donde  $\theta_c$  es el ángulo con la dirección del punto de mínima distancia (periastro). Las asíntotas corresponden a  $r \rightarrow \infty$ , que se obtiene cuando el denominador de la ecuación polar de la trayectoria se vuelve cero. Entonces:

$$1 + e \cos \theta_c = 0 \Leftrightarrow \theta_c = \cos^{-1}\left(-\frac{1}{e}\right) \quad (2)$$

Por otra parte, podemos escribir la relación:

$$2(\pi - \theta_c) + \Theta = \pi \quad (3)$$

Podemos escribir el momento angular como:

$$\vec{L} = m\vec{E}\vec{V} \times \vec{v}_0 = m(\vec{E}\vec{H} + \vec{H}\vec{V}) \times \vec{v}_0 = m\vec{H}\vec{V} \times \vec{v}_0, \quad (4)$$

ya que los vectores  $\vec{E}\vec{P}$  y  $\vec{v}_0$  son paralelos. Ya que  $(HV)$  y  $\vec{v}_0$  son ortogonales, la componente del momento angular perpendicular al plano se escribe simplemente:

$$\mathcal{L} = mbv_0, \quad (5)$$

donde  $b$  es el parámetro de impacto (ver figura). Igualando esta cantidad con la expresión del momento angular en función del semi-eje mayor y excentricidad, que es:

$$\mathcal{L} = m \sqrt{GMa(e^2 - 1)}, \quad (6)$$

obtenemos:

$$GMa(e^2 - 1) = v_0^2 b^2$$

Usamos la relación  $E = GMm/2a = (1/2)mv_0^2$  para sustituir  $a$  en esta expresión y obtenemos finalmente:

$$e = \left(1 + \frac{v_0^4 b^2}{G^2 M^2}\right)^{1/2} \quad (7)$$

La velocidad de la masa  $m$  después del encuentro, a gran distancia de la masa  $M$ , tiene la magnitud  $v_0$ , por lo que, en la base  $(Exy)$ , se puede escribir como  $(v_0 \cos \Theta, -v_0 \sin \Theta)$ . La variación de velocidad a lo largo del eje  $(Ex)$  se escribe por ende:

$$\Delta v_{\parallel} = -v_0(1 - \cos \Theta) = -v_0(1 + \cos 2\theta_c) = -2v_0 \cos^2 \theta_c = -\frac{2v_0}{e^2}$$

Usando el valor de  $e$  obtenido en la Ec. (7), obtenemos finalmente:

$$\Delta v_{\parallel} = -\frac{2v_0}{1 + \frac{v_0^4 b^2}{G^2 M^2}}$$

Por unidad de tiempo, una corona de diámetro  $b$  y ancho  $db$  barre un volumen  $dV = 2\pi b db V_0$ , que contiene  $ndV$  estrellas. Cada una de éstas comunica a la masa  $M$  una cantidad de momento  $m|\Delta v_{||}|$ , con lo cual la fuerza total es dada por la integral:

$$\begin{aligned} F &= \int_0^{b_{\max}} m|\Delta v_{||}| \times 2\pi b v_0 n db \\ &= 2\pi m n V_0^2 \int_0^{b_{\max}} \frac{2b db}{1 + \frac{v_0^4 b^2}{G^2 M^2}} \end{aligned} \quad (8)$$

Efectuando el cambio de variable  $x = v_0^2 b / GM$ , llegamos a:

$$F = 2\pi m n \frac{G^2 M^2}{v_0^2} \int_0^{x_{\max}} \frac{2x}{1 + x^2} dx$$

que se integra inmediatamente en:

$$F = 2\pi m n \frac{G^2 M^2}{v_0^2} \ln(1 + x_{\max}^2),$$

Se nota que esta fuerza diverge logarítmicamente con la extensión máxima del sistema. Cuando  $x_{\max}$  es grande, esta expresión se simplifica en:

$$F = 4\pi m n \frac{G^2 M^2}{v_0^2} \ln(x_{\max}). \quad (9)$$

Chandrasekhar consideró un caso mas general que éste, en el cual las estrellas del enjambre no estaban fijas si no que tenían una distribución arbitraria de velocidades. En el caso particular en que esta distribución es Maxweliana, se obtiene:

$$F = 4\pi m n \frac{G^2 M^2}{v_0^2} \ln(x_{\max}) \left[ \operatorname{erf}(X) - \frac{2X}{\sqrt{\pi}} \exp(-X^2) \right], \quad (10)$$

donde

$$X = v_0 / \sqrt{2}\sigma, \quad (11)$$

$\sigma$  siendo la dispersión de velocidades del enjambre. Notase que esta fuerza es opuesta al movimiento de la estrella E en el referencial amarrado al enjambre, razón por la cual se le califica de fricción.

## 2. Fricción dinámica en un gas

Varias décadas después del trabajo de Chandrasekhar, se planteó la pregunta de la fricción dinámica que experimenta un perturbador masivo al viajar a través de un gas adiabático. Estudios tempranos distinguieron el caso subsónico, en el que la velocidad del perturbador  $v_0$  es menor a la velocidad del sonido  $c_s$ , del caso supersónico ( $v_0 > c_s$ ). Inicialmente se pensaba que la fuerza era nula en el caso subsónico [6], pero posteriormente [5] mostró mediante un análisis lineal que no era el caso y que había una fuerza neta en el caso subsónico, proporcional a la velocidad en el límite de pequeños números de Mach. Posteriormente, [7] confirmaron mediante simulaciones numéricas no-lineales los resultados de [5].

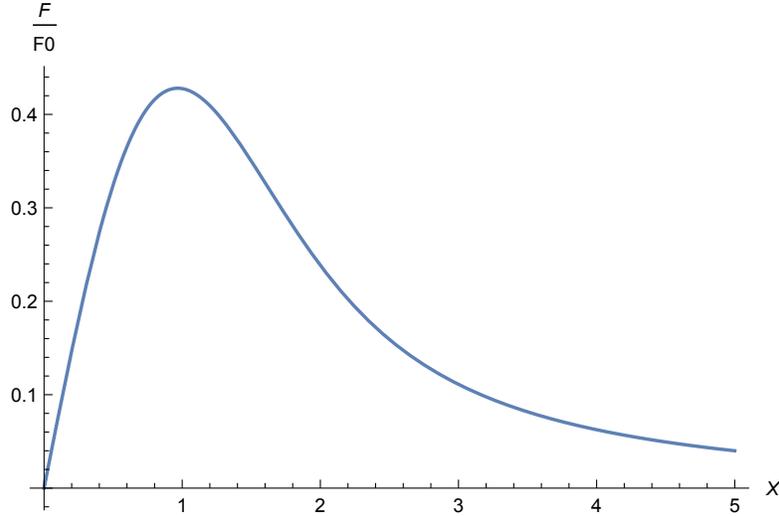


Figura 2: Representación gráfica de la fricción dinámica en un enjambre de estrellas con distribución maxweliana. La variable  $X$  está definida en la Ec. (11), mientras que  $F_0$  vale  $4\pi mnG^2 M^2/v_0^2 \ln(x_{\max})$ .

### 3. Fuerza sobre un perturbador luminoso

Hasta fechas recientes, se había exclusivamente estudiado la fricción dinámica sobre perturbadores masivos no luminosos. Sin embargo, el calor liberado por un perturbador caliente puede impartir una perturbación importante sobre su entorno, y por ende modificar la fricción dinámica. Esto es particularmente importante en el caso de los embriones planetarios embebidos en discos protoplanetarios opacos. Estos embriones suelen estar calentados por el bombardeo de material sólido del disco (como piedras o planetesimales). Su superficie se vuelve luminosa e irradia calor al disco circundante. La alta opacidad del gas hace que el calor se queda atrapado en una región de tamaño relativamente pequeño (típicamente una décima parte del grosor del disco), donde imparte una perturbación de densidad que puede alterar significativamente la fuerza gravitatoria que recibe del disco. [4] han estudiado este efecto en el contexto de la fricción dinámica (es decir en un medio tridimensional en reposo y homogéneo), que es mas simple que el de los discos protoplanetarios (en los cuales la cizalla kepleriana vuelve mas compleja la perturbación). Este estudio puede hacerse en régimen lineal (cuando la magnitud relativa de la perturbación es pequeña). En este régimen, se puede separar la contribución de la gravedad del perturbador (estudiada por [5]) de la contribución de su luminosidad. La perturbación total es la suma de las perturbaciones debidas a la gravedad y a la luminosidad, consideradas separadamente, y la aceleración total es la suma de las dos aceleraciones. La segunda, en particular, es la aceleración debida a la perturbación de densidad impartida por una perturbador luminoso sin masa. Notando  $L$  la luminosidad del perturbador, [4] encontraron la expresión de la perturbación en dos casos límites:

- En el caso de pequeño número de Mach, la aceleración debida a la luminosidad es:

$$a_L = \frac{(\gamma - 1)\gamma GL}{2\chi c_s^2}, \quad (12)$$

donde  $\gamma$  es el índice adiabático del gas y  $\chi$  su difusividad térmica.

- En el caso de un gran número de Mach, la aceleración debida a la luminosidad es:

$$a_L = \frac{(\gamma - 1)GL}{\chi v_0^2} f(r_{min}v_0/4\chi), \quad (13)$$

donde  $r_{min}$  es el radio físico del cuerpo y  $f$  una función que diverge logarítmicamente cuando su argumento es pequeño.

Posteriormente, se realizaron simulaciones numéricas para comprobar estas expresiones. Estas simulaciones numéricas se hicieron con el código numérico público FARGO3D [1], y se muestran los resultados en la figura 3. La fuerza de calentamiento es de mismo sentido que el movimiento. Se opone

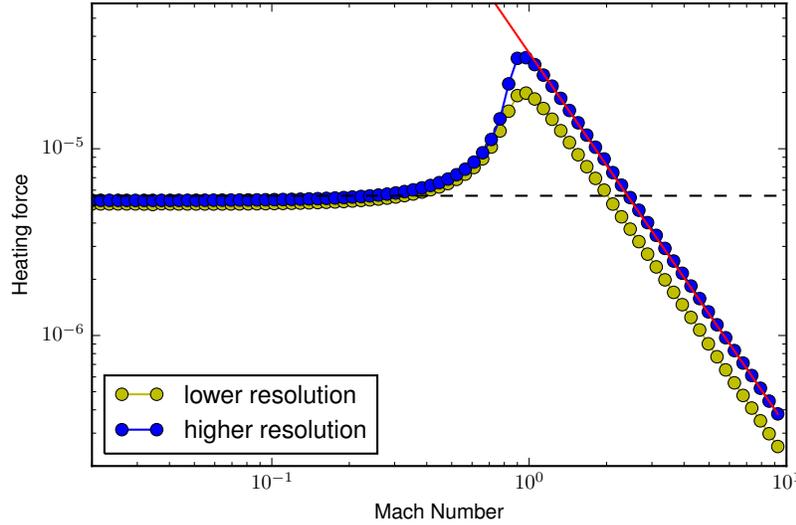


Figura 3: Fuerza debida a la luminosidad (o *heating force*) en función del número de Mach. La línea punteada muestra el resultado de la Ec. (12), mientras que la recta roja muestra una dependencia en  $v_0^{-2}$  como la de la Ec. (13). Se puede apreciar que la fuerza de calentamiento crece cuando la resolución crece (y por ende  $r_{min}$  es mas pequeño).

por ende a la fricción dinámica, y si la luminosidad del cuerpo es suficiente, puede llevar a la aceleración de éste, en lugar de su frenado. Esto sugiere que embriones calientes en un disco protoplanetario pueden ver su excentricidad e inclinación excitadas, en lugar de amortiguadas, si son suficientemente luminosos. Para comprobar esta aserción, [3] han realizado simulaciones de embriones luminosos de baja masa (alrededor de una masa terrestre) embebidos en un disco protoplanetario opaco. En estas simulaciones, en lugar de considerar una difusividad térmica *ad hoc* del gas, se resuelven las ecuaciones de la transferencia radiativa (de forma simplificada), lo cual *de facto* permite la difusión térmica en el disco. La figura 4 muestra como la liberación de calor induce la aparición de una región caliente atrás del planeta a lo largo de su movimiento epicíclico. Esta región da lugar a una fuerza de calentamiento similar a la que aparece en el estudio de fricción dinámica y empuja el planeta, oponiéndose a los efectos de mareas que tienden a amortiguar excentricidad e inclinación. La figura 5 muestra el resultado de simulaciones de larga duración (2500 órbitas). Se ve como la excentricidad e inclinación inicialmente tienen una fase de aumento exponencial con el tiempo. Posteriormente saturan alrededor de  $t = 500$  órbitas. La excentricidad satura a un valor mucho mayor al de la inclinación. Esto puede tener consecuencias muy importantes sobre escenarios de formación planetaria, por las siguientes razones:

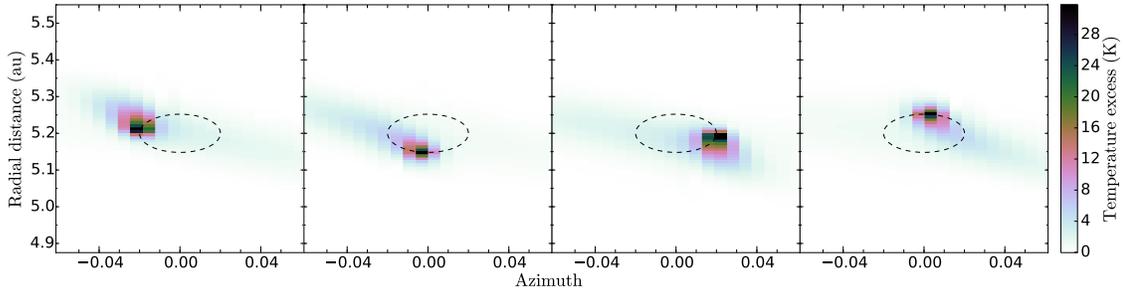


Figura 4: Perturbación de temperatura inducida en el plano ecuatorial del disco por un planeta excéntrico. Cada figura está centrada sobre el centro guiador de la órbita y la elipse en línea punteada representa la trayectoria epicíclica del planeta, que está descrita en el sentido contrario de las manecillas de un reloj. Un cuarto de período orbital separa dos figuras consecutivas. Se puede apreciar como una “cola” caliente sigue el planeta.

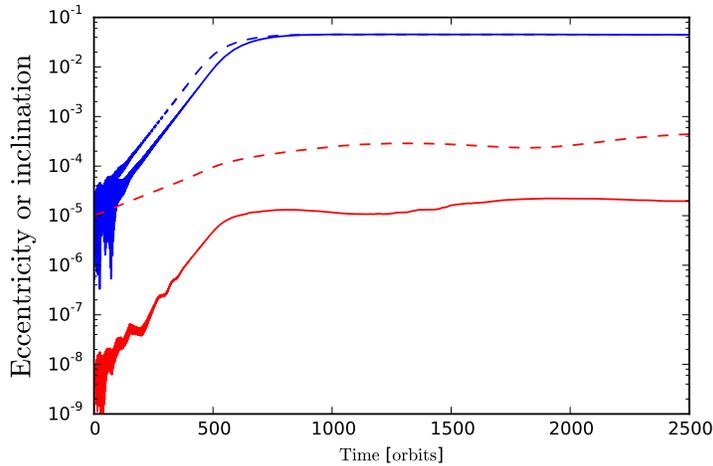


Figura 5: Comportamiento de la excentricidad  $e$  (azul) e inclinación  $i$  (rojo) de un protoplaneta de una masa terrestre que debe su luminosidad a la acreción de masa sólida tal que se dobla su masa en  $5 \cdot 10^4$  años. Las líneas sólidas representan una corrida obtenida con las condiciones iniciales  $(e_0, i_0) \approx (10^{-6}, 10^{-9})$ , mientras que las líneas punteadas representan una corrida obtenida con las condiciones iniciales  $(e_0, i_0) = (10^{-5}, 10^{-5})$ .

- Todos los escenarios elaborados a la fecha suponen que los embriones presentes en el disco tienen su excentricidad e inclinación amortiguadas por efecto de marea con el disco. Aquí no es el caso: el disco los excita.
- El aumento mucho mayor de la excentricidad hace que el conjunto de embriones podría comportarse de manera bidimensional: los embriones no pueden pasar uno encima del otro como cuando la inclinación está excitada, lo cual es muy favorable a colisiones y a una formación planetaria rápida.

Sin embargo, el comportamiento del sistema a muy largo plazo queda todavía por determinar: puede ocurrir relajación dinámica entre embriones que lleva las excentricidades e inclinaciones a estar en equipartición. Por otro lado, si la luminosidad de un embrión decae abajo de cierto umbral, la excentricidad e inclinación van a estar amortiguadas en lugar de excitadas. El comportamiento temporal de la luminosidad de un embrión depende tanto de su tasa de acreción como de su temperatura interna.

A la fecha estas problemáticas constituyen esencialmente problemas abiertos.

## 4. Conclusiones

Si bien el concepto de fricción dinámica es un concepto relativamente antiguo de la astrofísica, la fuerza gravitatoria entre un cuerpo caliente y un gas opaco en el cual se mueve revela efectos novedosos que pueden tener un fuerte impacto sobre los escenarios de formación planetaria actuales. En particular, el paradigma de la amortiguación de excentricidad e inclinación por el disco protoplanetario se está volviendo obsoleto. El estudio de estos novedosos efectos puede efectuarse de dos maneras complementarias: o bien por estudios analíticos, obtenidos esencialmente mediante la linealización de las ecuaciones de la hidrodinámica, o bien por estudios numéricos, involucrando simulaciones masivas con códigos especializados. El que dispongamos de estas dos herramientas (analítica y numérica) permite corroborar los resultados, y permite delinear los límites del espacio de parámetros dentro del cual el análisis lineal es válido. Estos nuevos efectos abren muchas problemáticas nuevas, tales como la determinación del historial térmico de los embriones planetarios y su relación con el historial de acreción de masa, o la dinámica de un enjambre de embriones sometidos a una excitación de excentricidad (y casi ningún efecto sobre la inclinación). En los próximos años los escenarios de formación planetaria deberían verse considerablemente modificados por la inclusión de estos efectos.

## Referencias

- [1] P. Benitez-Llambay and F. S. Masset. FARGO3D: A New GPU-oriented MHD Code. *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, 223:11, March 2016.
- [2] S. Chandrasekhar. Dynamical Friction. I. General Considerations: the Coefficient of Dynamical Friction. *Astrophys. J.*, 97:255, March 1943.
- [3] H. Eklund and F. S. Masset. Evolution of eccentricity and inclination of hot protoplanets embedded in radiative discs. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 469:206–217, July 2017.
- [4] F. S. Masset and D. A. Velasco Romero. Dynamical friction on hot bodies in opaque, gaseous media. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 465:3175–3184, March 2017.
- [5] E. C. Ostriker. Dynamical Friction in a Gaseous Medium. *Astrophys. J.*, 513:252–258, March 1999.
- [6] Y. Rephaeli and E. E. Salpeter. Flow past a massive object and the gravitational drag. *Astrophys. J.*, 240:20–24, August 1980.
- [7] F. J. Sánchez-Salcedo and A. Brandenburg. Deceleration by Dynamical Friction in a Gaseous Medium. *Astrophys. J. Lett.*, 522:L35–L38, September 1999.

Métodos algebraicos aplicados al sistema no estacionario átomo-cavidad  
óptica  
J. Récamier Angelini, C. A. González Gutiérrez, O. de los Santos Sánchez,  
R. Román Ancheyta  
Instituto de Ciencias Físicas, UNAM  
Apdo. Postal 48-3, Cuernavaca, Morelos 62251, México  
M. Berrondo  
Department of Physics and Astronomy, Brigham Young University, Provo  
UT 84602, USA.

### **Abstract**

En este curso analizamos la generación de fotones en una cavidad ideal (unidimensional) con paredes oscilantes en presencia de un átomo de dos niveles. Utilizando técnicas de álgebras de Lie, construimos un operador de evolución aproximado y exploramos su validez no sólo en los regímenes resonante y dispersivo sino también para otros valores de los parámetros del sistema. Hemos encontrado una muy buena concordancia con los resultados puramente numéricos.

## **1 Introducción**

En 1970 Moore publicó un artículo en donde estudia la teoría cuántica de luz linealmente polarizada que se propaga en una cavidad acotada por dos espejos paralelos ideales, infinitos, perfectos que se mueven con trayectorias arbitrarias [1]. En este trabajo predijo la creación de fotones generados a partir del estado de vacío del campo electromagnético debido a las variaciones no adiabáticas en las condiciones de frontera del campo. Este efecto se conoce ahora como el Efecto Casimir Dinámico (DCE por sus siglas en inglés). Para que el efecto se produzca es necesario modular rápidamente las condiciones de frontera del campo electromagnético con velocidades cercanas a la de la luz, lo cual no es factible para espejos reales. Para dar la vuelta a esta dificultad, se han considerado sistemas análogos como circuitos superconductores [2] y una implementación con iones atrapados fue hecha más recientemente [3]. Se ha mostrado que se puede esperar un número apreciable de fotones en cavidades ideales con condiciones de frontera oscilantes en condiciones de resonancia [4]. El modelo más sencillo que describe este efecto consiste de una cavidad resonante (que soporta un modo) cuya frecuencia se modula rápidamente. El comportamiento del sistema cuando se tiene además un segundo sistema

dentro de la cavidad (un detector) puede ser muy distinto. En el trabajo que presentamos aquí, consideramos al detector como un átomo de dos niveles que interactúa con el campo de la cavidad y analizamos la evolución temporal del campo en esta cavidad no estacionaria.

## 2 El modelo y su solución aproximada

Consideremos el caso de una cavidad cerrada con una pared movible que ejecuta un movimiento periódico y que contiene a un átomo de dos niveles dentro de ella. El Hamiltoniano más simple que describe este sistema es

$$\hat{H}(t) = \omega(t)\hat{n} + \chi(t)(\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2}) + \frac{\Omega}{2}\hat{\sigma}_z + g(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\sigma_+ + \sigma_-) \quad (1)$$

en donde  $\hat{n}$ ,  $\hat{a}$  y  $\hat{a}^\dagger$  son los operadores usuales de número, aniquilación y de creación y  $\sigma_z$ ,  $\sigma_+$ ,  $\sigma_-$  son las matrices de Pauli que representan al átomo de dos niveles,  $g$  es una medida de la intensidad del acoplamiento átomo-campo que tiene unidades de frecuencia y estamos usando  $\hbar = 1$ . Elegimos

$$\chi(t) = \frac{1}{4\omega(t)} \frac{d\omega(t)}{dt}, \quad \omega(t) = \omega_0(1 + \epsilon \sin(\eta t))$$

con  $\epsilon \ll 1$  una modulación de amplitud y  $\eta$  la frecuencia de la modulación. Se sabe que en ausencia de átomo y con las condiciones  $\eta \simeq 2\omega_0$ ,  $\epsilon\omega_0 t \geq 1$  el número medio de fotones crece exponencialmente [4]. Debido a que  $\epsilon \ll 1$  hacemos  $\omega(t) = \omega_0$  y definimos el Hamiltoniano no perturbado  $\hat{H}_0$  como:

$$\hat{H}_0 = \omega_0\hat{n} + \frac{\Omega}{2}\hat{\sigma}_z + \chi(t)(\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2}) \quad (2)$$

en donde  $\chi(t) = (\omega_0\epsilon/2) \cos(2\omega_0 t)$  y la perturbación queda

$$V = g(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\sigma_+ + \sigma_-) \quad (3)$$

El conjunto de operadores que aparece en el Hamiltoniano no perturbado es tal que, el conmutador de dos cualesquiera de ellos también pertenece al conjunto (esto es, el conjunto cierra un algebra ante la operación de conmutación). Estos operadores están expresados en la representación de

Schrödinger y no dependen explícitamente del tiempo, por lo tanto, el operador de evolución temporal correspondiente puede escribirse, en forma exacta, como un producto de exponenciales (teorema de Wei-Norman)[5]:

$$\hat{U}_0 = e^{-i\frac{\Omega}{2}t\sigma_z} e^{\gamma_1\hat{n}} e^{\gamma_2\hat{a}^{\dagger 2}} e^{\gamma_3\hat{a}^2} e^{\gamma_4}, \quad (4)$$

con funciones complejas, dependientes del tiempo  $\gamma_i$  las cuales satisfacen el conjunto de ecuaciones acopladas

$$\dot{\gamma}_1 = -i(\omega_0 + 4e^{2\gamma_1}\chi(t)\gamma_2) \quad (5)$$

$$\dot{\gamma}_2 = -i(e^{-2\gamma_1} + 4e^{2\gamma_1}\gamma_2^2)\chi(t), \quad (6)$$

$$\dot{\gamma}_3 = -ie^{2\gamma_1}\chi(t), \quad (7)$$

$$\dot{\gamma}_4 = -i2e^{2\gamma_1}\gamma_2\chi(t). \quad (8)$$

El operador de evolución temporal en la representación de interacción satisface la ecuación[6]:

$$i\partial_t\hat{U}_I = [\hat{U}_0^\dagger V \hat{U}_0] \hat{U}_I = \hat{H}_I \hat{U}_I \quad (9)$$

con la condición inicial  $U_I(t_0, t_0) = 1$ .

Transformando la interacción obtenemos el Hamiltoniano en la representación de interacción como

$$H_I(t) = g \left[ ((t_1 + t_3)\hat{a} + (t_2 + t_4)\hat{a}^\dagger)(\sigma_+ e^{i\Omega t} + \sigma_- e^{-i\Omega t}) \right] \quad (10)$$

en donde los coeficientes  $t_i$  están dados por:

$$t_1 = e^{\gamma_1}(1 - 4\gamma_2\gamma_3) \quad (11)$$

$$t_2 = 2e^{\gamma_1}\gamma_2 \quad (12)$$

$$t_3 = -2e^{-\gamma_1}\gamma_3 \quad (13)$$

$$t_4 = e^{-\gamma_1}. \quad (14)$$

Al tomar los productos en la ecuación (10) se obtienen términos que conservan el número total de excitaciones ( $\hat{a}^\dagger\sigma_-$ ,  $\hat{a}\sigma_+$ ) y términos que no lo conservan ( $\hat{a}^\dagger\sigma_+$ ,  $\hat{a}\sigma_-$ ). Despreciaremos a estos últimos debido a que oscilan muy rápidamente comparados con los dos primeros. Escribimos entonces un Hamiltoniano de interacción aproximado

$$\tilde{H}_I = g \left[ (t_1 + t_3)\hat{a}\sigma_+ e^{i\Omega t} + (t_2 + t_4)\hat{a}^\dagger\sigma_- e^{-i\Omega t} \right]. \quad (15)$$

Definimos ahora los operadores [7, 8, 9]

$$\hat{b} = \frac{\hat{a}\sigma_+}{\sqrt{M}}, \quad \hat{b}^\dagger = \frac{\hat{a}^\dagger\sigma_-}{\sqrt{M}}, \quad (16)$$

en donde  $M = n + \frac{1}{2}(1 + \sigma_z)$  es el número total de excitaciones en un escalón (campo+átomo). En un escalón podemos tener  $n$  excitaciones del campo y una del átomo (correspondiente al ket  $|n, e\rangle$ , el átomo en el estado excitado), o bien  $n + 1$  del campo y cero del átomo (correspondiente al ket  $|n + 1, g\rangle$ , el átomo en el estado base).

En términos de éstos operadores, el Hamiltoniano queda

$$\tilde{H}_I = \sqrt{M}g \left[ (t_1 + t_3)\hat{b}e^{i\Omega t} + (t_2 + t_4)\hat{b}^\dagger e^{-i\Omega t} \right], \quad (17)$$

este Hamiltoniano aproximado, solamente genera transiciones entre estados de un mismo escalón.

Para aclarar este punto consideremos el hamiltoniano

$$H = \hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right) + \hbar\frac{\Omega}{2}\hat{\sigma}_z$$

que corresponde a un campo de un solo modo y un átomo de dos niveles. Los estados propios del sistema los podemos escribir en términos de los estados de número (estados propios del operador de número) y los estados propios de  $\hat{\sigma}_z$ . Usando que:

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \text{y que, } \hat{\sigma}_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$$

encontramos que los valores propios del Hamiltoniano están dados por:

$$E_M = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \pm \hbar\frac{\Omega}{2}$$

en donde el signo + corresponde al estado excitado del átomo y el signo - al estado base. El número  $M$  cuenta las excitaciones del campo más las excitaciones del átomo (una para el estado excitado y cero para el estado base). El estado de más baja energía corresponde a  $n = 0$  (cero fotones) y átomo en el estado base  $|g\rangle$  ( $M = 0$ ), denotamos el ket correspondiente como  $|0, g\rangle$ . El siguiente estado corresponde a  $n = 0$  y átomo en el estado excitado  $|e\rangle$  representado con el ket  $|0, e\rangle$  o bien  $n = 1$  y átomo en  $|g\rangle$  representado con el ket  $|1, g\rangle$  (ambos con  $M=1$ ). Cuando  $\omega = \Omega$  se tienen condiciones

de resonancia y los estados  $|0, e\rangle$  y  $|1, g\rangle$  están degenerados. Cuando no se cumple la condición de resonancia, la separación entre estos estados, que tienen el mismo valor de  $M$ , es  $\Delta E = \hbar|\Omega - \omega|$  que es menor que la separación entre estados con diferente valor de  $M$ . Entonces, podemos ver que los valores propios del Hamiltoniano se acomodan en parejas de niveles (escalones de dos niveles) con números consecutivos de  $M$ , solamente el estado con  $M = 0$  contiene a un solo estado.

Los operadores  $\hat{b}$  y  $\hat{b}^\dagger$  producen transiciones entre estados de un mismo escalón (un mismo valor de  $M$ ). Por ejemplo para  $M = n + 1$  tenemos:

$$\hat{b}|n + 1, g\rangle = \frac{\sqrt{n + 1}}{\sqrt{M}}|n, e\rangle = |n, e\rangle, \quad \hat{b}^\dagger|n, e\rangle = \frac{\sqrt{n + 1}}{\sqrt{M}}|n + 1, g\rangle = |n + 1, g\rangle$$

El conjunto de operadores  $\{\hat{b}, \hat{b}^\dagger, \hat{\sigma}_z\}$  también es cerrado ante conmutación,

$$[\hat{b}^\dagger, \hat{b}] = \hat{\sigma}_z, \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{b}] = 2\hat{b}, \quad [\hat{\sigma}_z, \hat{b}^\dagger] = -2\hat{b}^\dagger$$

por lo tanto, es posible escribir el operador de evolución temporal correspondiente a  $\tilde{H}_I$  como:

$$\tilde{U}_I = e^{\beta_z \hat{\sigma}_z} e^{\beta_+ \hat{b}^\dagger} e^{\beta_- \hat{b}} \quad (18)$$

con funciones  $\beta_z$ ,  $\beta_+$  y  $\beta_-$  por determinar. Estas cumplen con el conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas

$$\dot{\beta}_z = -ig\sqrt{M}e^{i\Omega t - 2\beta_z}(t_1 + t_3)\beta_+ \quad (19)$$

$$\dot{\beta}_+ = -ig\sqrt{M}(e^{-i\Omega t + 2\beta_z}(t_2 + t_4) + e^{i\Omega t - 2\beta_z}(t_1 + t_3))\beta_+^2 \quad (20)$$

$$\dot{\beta}_- = -ig\sqrt{M}e^{i\Omega t - 2\beta_z}(t_1 + t_3) \quad (21)$$

que se resuelven de forma numérica.

Consideremos un estado inicial puro, con  $M = n + 1$  excitaciones lo más general posible  $|\Psi(t_0)\rangle = \alpha|e, n\rangle + \beta|g, n + 1\rangle$ , debido a la normalización del estado tenemos que  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Al tiempo  $t$  el estado ha evolucionado en  $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}_0 \hat{U}_I |\Psi(t_0)\rangle$  y el valor medio de alguna observable estará dado por:

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{O} | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \hat{U}_I^\dagger \hat{U}_0^\dagger \hat{O} \hat{U}_0 \hat{U}_I | \Psi(t_0) \rangle \quad (22)$$

Aplicando  $\hat{U}_I$  al estado inicial obtenemos:

$$\begin{aligned} |\Psi_I(t)\rangle &= \hat{U}_I |\Psi(t_0)\rangle = e^{\beta_z}(\alpha + \beta\beta_-)|e, n\rangle + e^{-\beta_z}(\alpha\beta_+ + \beta(1 + \beta_+\beta_-))|g, n + 1\rangle, \\ &= C_{e,n}|e, n\rangle + C_{g,n+1}|g, n + 1\rangle \end{aligned} \quad (23)$$

Supongamos ahora que el operador  $\hat{O}$  es el operador de número, entonces

$$\begin{aligned}\hat{n}_I(t) = \hat{U}_0^\dagger \hat{n} \hat{U}_0 &= (1 - 8\gamma_2\gamma_3)\hat{n} + 2\gamma_2\hat{a}^{\dagger 2} + 2\gamma_3(4\gamma_2\gamma_3 - 1)\hat{a}^2 - 4\gamma_2\gamma_3 \\ &= g_{11}\hat{n} + g_{20}\hat{a}^{\dagger 2} + g_{02}\hat{a}^2 + g_{00}.\end{aligned}\quad (24)$$

El valor medio del operador de número está dado por:

$$\langle \Psi_I(t) | \hat{n}_I(t) | \Psi_I(t) \rangle = g_{11} [n|C_{e,n}|^2 + (n+1)|C_{g,n+1}|^2] + g_{00} \quad (25)$$

en donde hemos hecho uso de la condición de normalización

$$\langle \Psi_I(t) | \Psi_I(t) \rangle = |C_{e,n}|^2 + |C_{g,n+1}|^2 = 1.$$

### 3 Resultados semi-analíticos y numéricos

Si tomamos como estado inicial del sistema el estado  $|\Psi(t_0)\rangle = \alpha|e, 0\rangle + \beta|g, 1\rangle$  obtenemos para el valor esperado del operador de número:

$$\langle \Psi_I(t) | \hat{n}_I(t) | \Psi_I(t) \rangle = g_{11}|\alpha\beta_+|^2 e^{-2\Re\beta z} + g_{00}. \quad (26)$$

Los efectos de la interacción átomo-campo están presentes a través de las funciones  $\beta_i$ . Los resultados numéricos para el caso en que  $|\Psi(t_0)\rangle = |e, 0\rangle$  se presentan en la figura 1. Los parámetros utilizados para este cálculo fueron, para la figura en la parte superior:  $\Omega = 0.2\omega_0$ ,  $\epsilon = 0.02$ ,  $|\Omega - \omega_0| \gg g = 0.05\omega_0$  y para la figura en la parte inferior  $\Omega = \omega_0$ ,  $\epsilon = 0.02$ ,  $g = 0.05\omega_0$  que corresponden respectivamente a los regímenes dispersivo y resonante reportados en la referencia [10]. En azul se muestra el caso en que no hay interacción entre el átomo y el campo, en amarillo se muestra el caso con interacción. Se ve claramente que el efecto de la interacción con el átomo es el de incrementar la generación de fotones tanto para el regimen dispersivo como para el resonante y producir un comportamiento oscilatorio de alta frecuencia para el caso dispersivo y baja frecuencia para el caso resonante. Resultados numéricos obtenidos a partir de un desarrollo en una base de eigenestados del Hamiltoniano no perturbado muestran un comportamiento muy cercano al reportado aquí [11]. En la figura 2 se muestra la evolución temporal de la probabilidad de encontrar al átomo en el estado excitado cuando al tiempo inicial el estado del sistema estaba dado por  $|\Psi(t_0)\rangle = |e, 0\rangle$ . Esta probabilidad se calcula a partir de la expresión  $P_e(t) = Tr\{\rho_A|e\rangle\langle e|\}$ , con

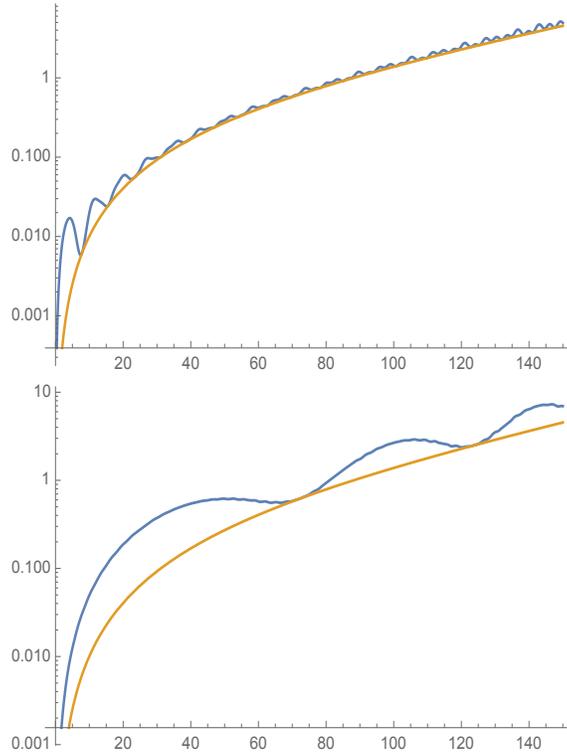


Figure 1: Evolución temporal del valor medio del operador de número para el estado inicial  $|e, 0\rangle$  con los parámetros descritos en el texto.

$\rho_A = Tr_F\{\rho_{AF}\}$  la matriz densidad reducida del átomo y  $\rho_{AF} = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$  el la matriz densidad del sistema completo. El resultado que se obtiene es:

$$P_e(t) = \frac{e^{2\Re\{\gamma_4 + \beta_z\}}}{\sqrt{1 - 4|\gamma_2|^2 e^{4\Re\{\gamma_1\}}}}. \quad (27)$$

Para el caso dispersivo, donde las frecuencias  $\Omega$  y  $\omega_0$  difieren significativamente, la probabilidad de transición atómica es una función oscilatoria de pequeña amplitud y alta frecuencia que muestra cómo el átomo permanece cerca de su estado inicial a lo largo de toda la evolución. Para el caso resonante, cuando las frecuencias coinciden  $\Omega = \omega_0$  encontramos que la probabilidad de encontrar al átomo en el estado excitado es una función oscilatoria que cubre el rango  $[0, 1]$ , esto es, hay ciertos valores del tiempo  $t = t_n$  para los

cuales el átomo se encuentra seguramente en el estado excitado ( $P_e(t_n) = 1$ ) y otros  $t = t_p$  para los cuales es seguro que se encuentra en el estado base ( $P_e(t_p) = 0$ ). La frecuencia de las oscilaciones se incrementa con el tiempo.

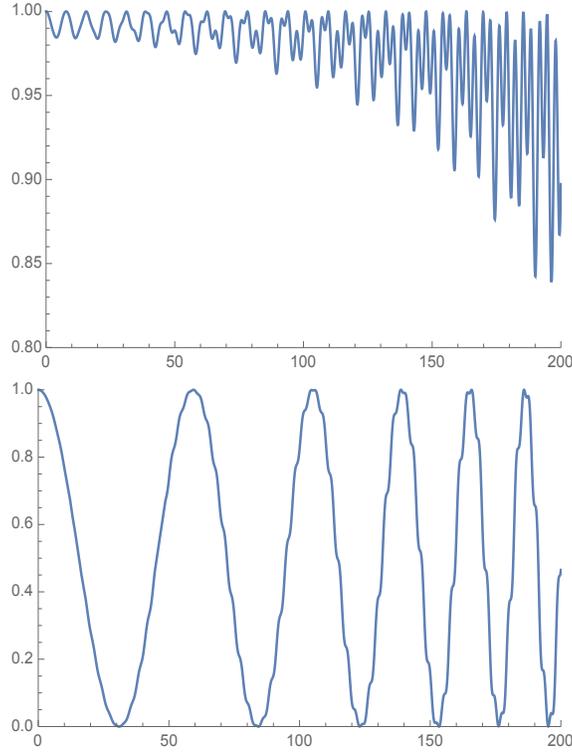


Figure 2: Evolución temporal de la probabilidad de encontrar al átomo en el estado excitado cuando al tiempo  $t_0$  el sistema está descrito por el estado puro  $|\Psi(t_0)\rangle = |e, 0\rangle$ . Figura superior, caso dispersivo  $\Omega = 0.2\omega_0$ , figura inferior, caso resonante  $\Omega = \omega_0$ . El resto de los parámetros son  $\epsilon = 0.02$ ,  $g = 0.05\omega_0$ ,  $\eta = 2\omega_0$ .

Para verificar la validez de las aproximaciones que hemos hecho en este trabajo, calculamos el valor medio del operador de número mediante un método puramente numérico utilizando una base suficientemente grande para garantizar convergencia [11]. Tomando como estado inicial el estado  $|e, 0\rangle$  y el Hamiltoniano dado por la ecuación 1 evolucionamos el estado del sistema al tiempo  $t$  y con éste calculamos el valor medio del operador de número.

En la figura 3 se muestran, en rojo los resultados obtenidos con la simulación numérica y en negro los obtenidos con la metodología expuesta en este trabajo. Como puede observarse de la figura, el método desarrollado aquí concuerda fielmente con los resultados numéricos.

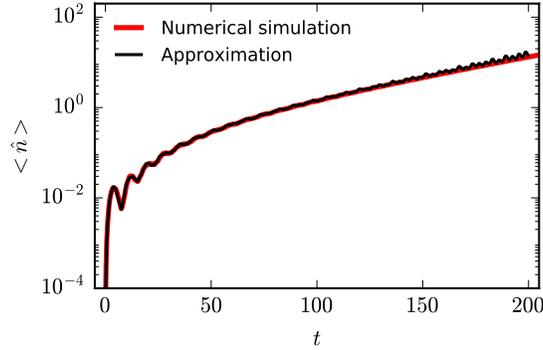


Figure 3: Evolución temporal del valor medio del operador de número. Los parámetros del sistema son  $\Omega = 0.2\omega_0$ ,  $\epsilon = 0.02$ ,  $g = 0.05\omega_0$ ,  $\eta = 2\omega_0$ . En rojo se muestran los resultados numéricos y en negro los resultados aproximados

## 4 Conclusiones

En estas notas hemos presentado un método aproximado para el estudio de una cavidad cerrada con paredes perfectamente reflejantes la cual contiene un átomo de dos niveles. Una de las paredes de la cavidad oscila ejecutando un movimiento periódico de pequeña amplitud y alta frecuencia. Tomamos como Hamiltoniano no perturbado a la parte atómica, la del campo y la proveniente del movimiento oscilatorio del espejo ya que este conjunto de operadores nos permite escribir el operador de evolución temporal en forma exacta. La parte de interacción es la correspondiente al acoplamiento átomo-campo la cual tratamos en la aproximación de onda rotante. Esta aproximación es válida siempre que la constante de acoplamiento sea significativamente menor a la frecuencia de transición atómica  $g \ll \Omega$ . Para corroborar la validez de nuestras aproximaciones usamos el mismo conjunto de parámetros que el utilizado en la referencia [10] en donde obtienen expresiones analíticas en los límites dispersivo y resonante y encontramos un buen acuerdo con

sus resultados. Para analizar la validez de nuestro método con parámetros fuera de estos límites, hicimos un cálculo puramente numérico tomando una base de tamaño tal que garantizara la convergencia deseada. Los resultados numéricos y aproximados muestran también una buena concordancia.

**Agradecimientos:** Agradecemos el apoyo recibido por medio del proyecto DGAPA-UNAM PAPIIT IN113016 y al Lic. Reyes García Carreón por el mantenimiento de nuestros equipos de cómputo. CGG y RRA agradecen al CONACyT por sus respectivas becas. OSS y MB agradecen al Instituto de Ciencias Físicas por su hospitalidad.

## References

- [1] Moore 1970
- [2] Wilson C. M., Duty T., Sandberg M., Persson F., Shumeiko V. and Delsing P., Phys. Rev. Lett. **105**, 233907 (2010); Wilson C. M., Johansson G., Pourkabirian A., Simonen M., Johansson J. R., Duty T., Nori F. and Delsing P., Nature (London) **479**, 376 (2011).
- [3] Trautmann N., and Hauke P., New Journal of Physics **18**, 043029 (2016).
- [4] Dodonov V. V., and Klimov A. B., Phys. Rev. A **53**, 2664 (1996).
- [5] Wei J. and Norman E., J. Math. Phys. **4**(4) 575 (1963)
- [6]
- [7] Rodríguez-Lara B. and Moya-Cessa H., J. Phys. A: Math. Theor. **46**(9) 095301 (2013).
- [8] Rodríguez-Lara B., Rodríguez-Méndez D and Moya-Cessa H., Phys. Lett. A **375** 3770 (2011).
- [9] Cordero S. and Récamier J., J. Phys. A: Math. Theor, **45**(38) 385303 (2012).
- [10] Dodonov A. V. and Dodonov V. V., Phys. Rev. A **85**, 015801 (2012).
- [11] C. González Gutiérrez, O. de los Santos Sánchez, R. Román Ancheyta, M. Berrondo, J. Récamier, JOSA-B (enviado, 2018).

# EL ESTUDIO DE LA COEXISTENCIA DE FASES POR MEDIO DE SIMULACIONES NUMÉRICAS (MÉTODOS DIRECTOS)

Humberto Saint-Martin  
*Instituto de Ciencias Físicas,*  
*Universidad Nacional Autónoma de México*



INSTITUTO DE  
CIENCIAS  
FÍSICAS

# La Biofísica

Biophysics is that branch of knowledge that applies the principles of physics and chemistry and the methods of mathematical analysis and computer modeling to understand how biological systems work.

<http://www.biophysics.org/>

<http://iupab.org>

[http://www.fis.unam.mx/investigacion\\_1a.htm](http://www.fis.unam.mx/investigacion_1a.htm)

<http://www.phdcomics.com>

## Sobre el Rigor en la Ciencia

En aquel Imperio, el Arte de la Cartografía logró tal Perfección que el Mapa de una sola Provincia ocupaba toda una Ciudad, y el Mapa del Imperio, toda una Provincia. Con el tiempo, estos Mapas Desmesurados no satisficieron y los Colegios de Cartógrafos levantaron un Mapa del Imperio, que tenía el Tamaño del Imperio y coincidía puntualmente con él.

Menos Adictas al Estudio de la Cartografía, las Generaciones Sigüientes entendieron que ese dilatado Mapa era Inútil y no sin Impiedad lo entregaron a las Inclemencias del Sol y los Inviernos. En los Desiertos del Oeste perduran despedazadas Ruinas del Mapa, habitadas por Animales y por Mendigos; en todo el País no hay otra reliquia de las Disciplinas Geográficas.

Suárez Miranda: *Viajes de varones prudentes*  
Libro Cuarto, Cap. XLV, Lérica 1658

De: *El hacedor* (1960), por **Jorge Luis Borges**



# Las simulaciones de sistemas *reales*

Un modelo:

1. La representación del sistema
2. Un conjunto de reglas (las 'Leyes Naturales' del modelo)

Adicionalmente: un *estado inicial* y unas *influencias externas*

Dado un propósito, el modelo debe ser  
*Atinado (preciso) y eficiente*

Factible con los medios técnicos disponibles

# La respuesta (simulada) a la pregunta depende de:

El estado de desarrollo de las teorías pertinentes (los *modelos* y los *métodos de solución*)

Las capacidades computacionales

Las posibilidades de implementar los métodos de solución en algoritmos

Las posibilidades de validar al modelo

# Traza

- Algunas definiciones
- Motivación
- Los hielos y los modelos moleculares de agua
- Los hidratos de metano y la coexistencia de tres fases
- El diagrama de fases de una bicapa de fosfolípidos
- La solubilidad de la sal (NaCl)
- El metanol como anticongelante
- Conclusiones generales

# Algunas definiciones

- **Fase:** Cada una de las partes homogéneas físicamente separables en un sistema formado por uno o varios componentes ([www.rae.es](http://www.rae.es))
- **Fase:** Región de un sistema que tiene una composición química uniforme y propiedades físicas uniformes. (“Química Física” de G. W. Castellan)
- **Sustancia pura:** Aquélla que tiene una composición química fija. Una sustancia pura puede existir en diferentes fases. **Una fase** es un arreglo molecular distinguible, homogéneo en todas partes y que se separa de las demás por medio de superficies frontera fácilmente identificables (“Termodinámica” de Y. A. Cengel y M. A. Boles).

# Motivación

- La coexistencia de fases es un fenómeno común
- Del cual hay muchos “casos de interés” (hielo(s) con agua, “el agua y el aceite no se mezclan”, la solución acuosa con el precipitado)
- La coexistencia implica que las fases estén en equilibrio (algo bueno para las simulaciones numéricas). El potencial químico de cada sustancia debe tener el mismo valor en cada fase en que aparezca tal sustancia.
- *Exceptio probat regulam...* (un buen examen para los “campos de fuerza” que se diseñan para describir líquidos puros)

# Los hielos

[HTML ABSTRACT + LINKS](#)

- Con agradecimiento a



Carlos Vega

Sin imagen disponible

José Luis F. Abascal



THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 122, 234511 (2005)

## A potential model for the study of ices and amorphous water: TIP4P/Ice

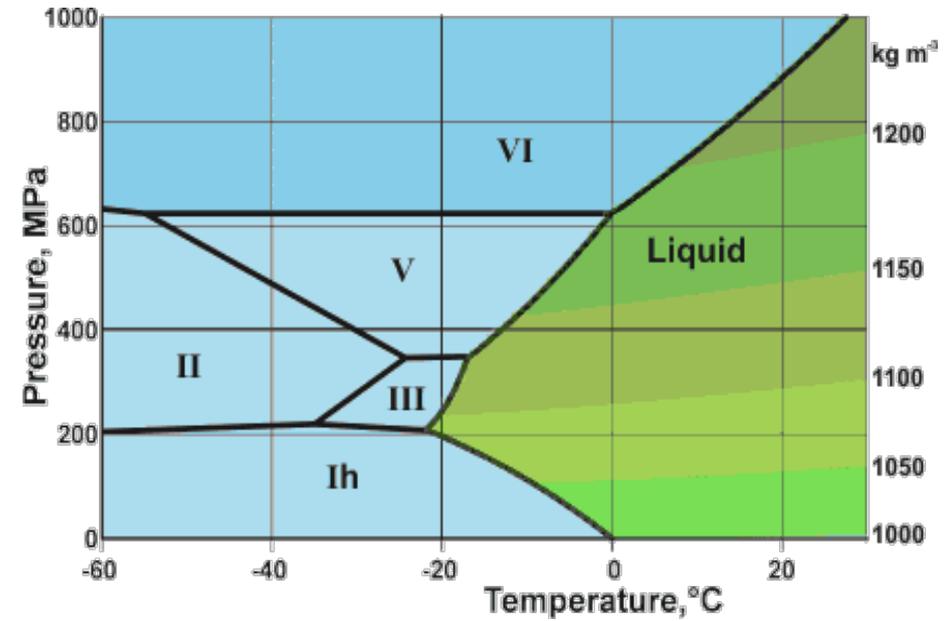
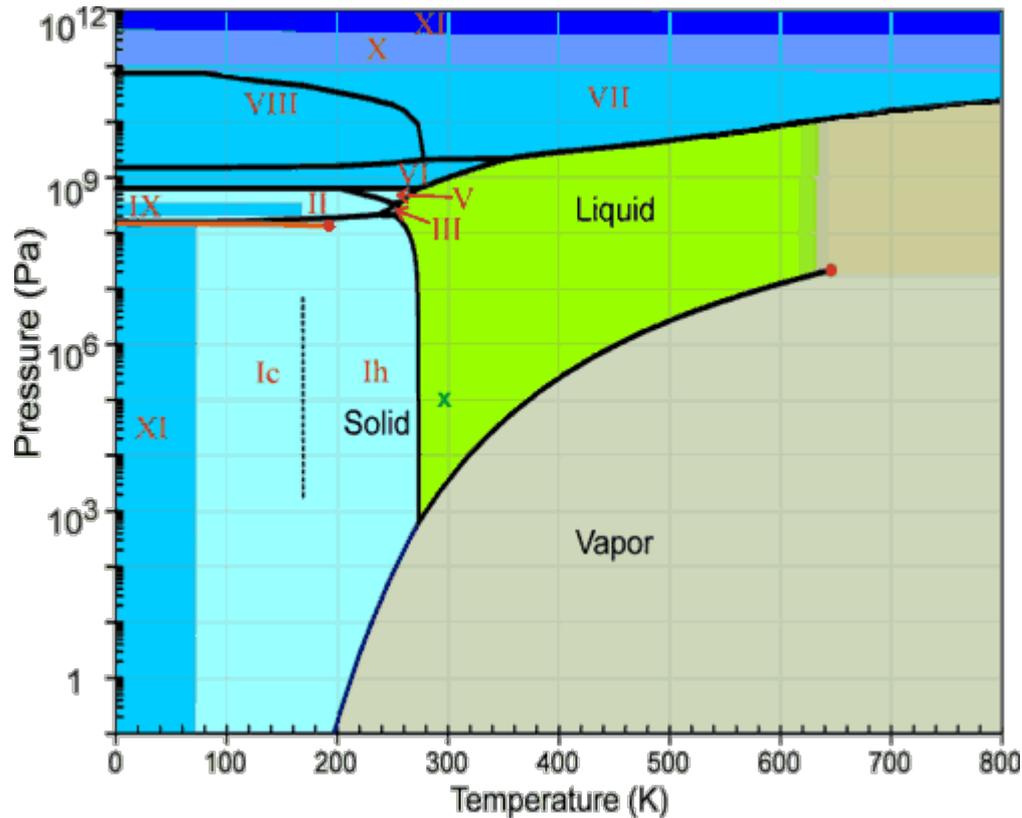
J. L. F. Abascal, E. Sanz, R. García Fernández, and C. Vega

*Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense, 28040 Madrid, Spain*

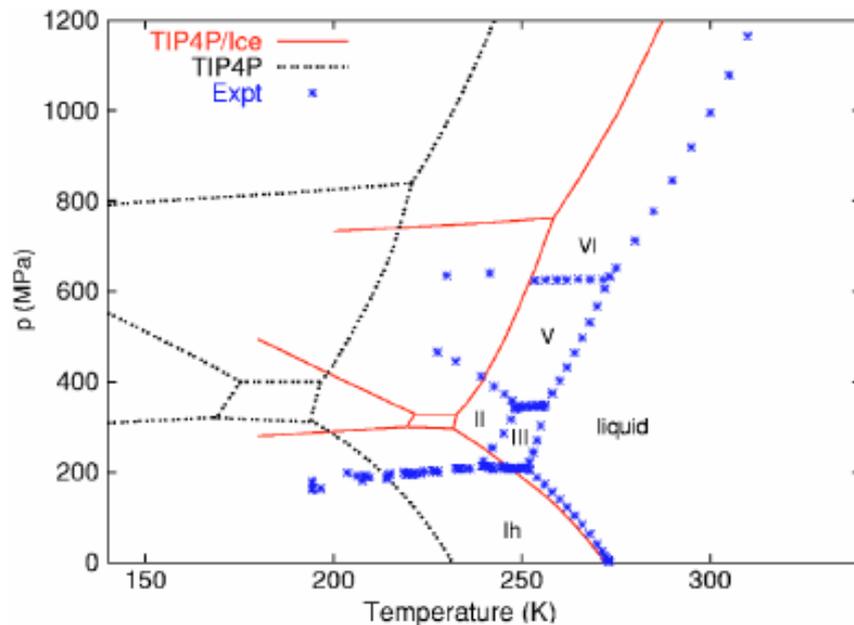
(Received 18 March 2005; accepted 20 April 2005; published online 23 June 2005)

The ability of several water models to predict the properties of ices is discussed. The emphasis is put on the results for the densities and the coexistence curves between the different ice forms. It is concluded that none of the most commonly used rigid models is satisfactory. A new model specifically designed to cope with solid-phase properties is proposed. The parameters have been obtained by fitting the equation of state and selected points of the melting lines and of the coexistence lines involving different ice forms. The phase diagram is then calculated for the new potential. The predicted melting temperature of hexagonal ice (I<sub>h</sub>) at 1 bar is 272.2 K. This excellent value does not imply a deterioration of the rest of the properties. In fact, the predictions for both the densities and the coexistence curves are better than for TIP4P, which previously yielded the best estimations of the ice properties. © 2005 American Institute of Physics.  
[DOI: 10.1063/1.1931662]

# El diagrama de fases del agua

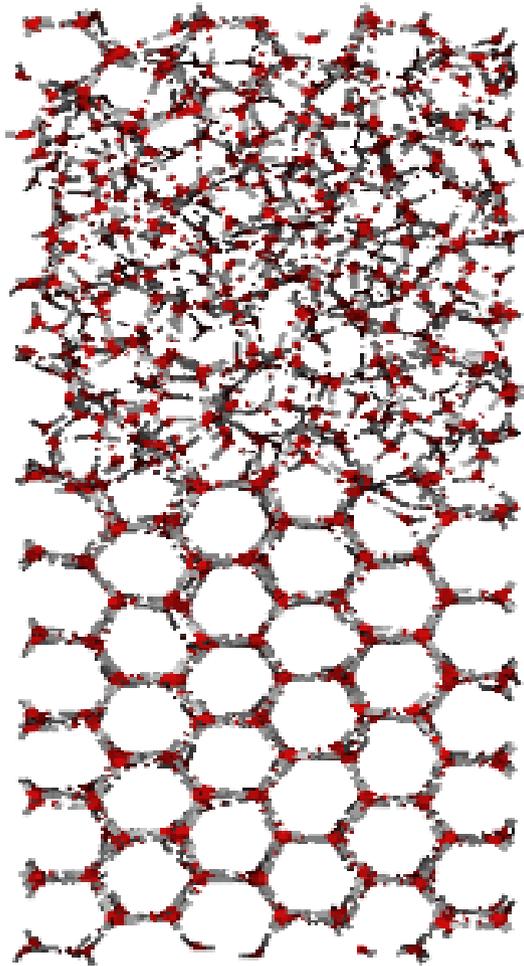


# La simulación del diagrama de fases de algunos hielos

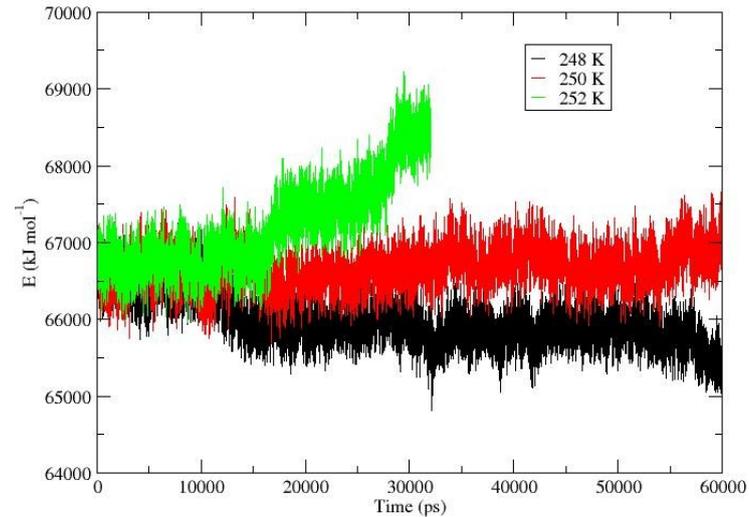


- TIP4P/Ice se diseñó para reproducir este diagrama
- Se ajustó para dar  $T_m(\text{Ih}) = 270 \text{ K}$  bajo  $p = 1 \text{ bar}$
- $T_{\rho\text{max}} = 300 \text{ K} ! (> 277 \text{ K})$
- TIP4P/2005 se ajustó para reproducir la ecuación de estado  $\rho$  vs  $T$
- TIP4P/ $\epsilon$  se ajustó para reproducir la constante dieléctrica
- A la fecha no conozco modelo alguno que reproduzca simultáneamente  $T_m(\text{Ih})$  y  $T_{\rho\text{max}}$

# Fundiendo el hielo Ih (nuestro modelo sofisticado)



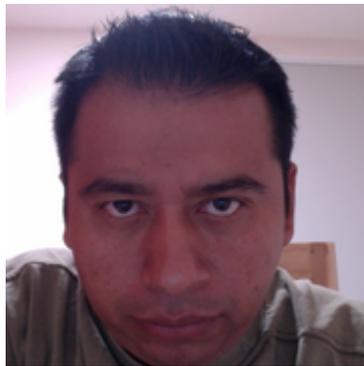
$E_{\text{pot}}$  vs. time



MD con GROMACS  
870 moléculas de agua MCDHO2  
NPT,  $P = 1$  bar, *semi-isotrópico*  
Constricciones flexibles ( $\Delta t = 2$  fs)  
(B. Hess et al., *J. Chem. Phys.* **2002**, 116: 9602)

# Los hidratos de metano

- En colaboración con

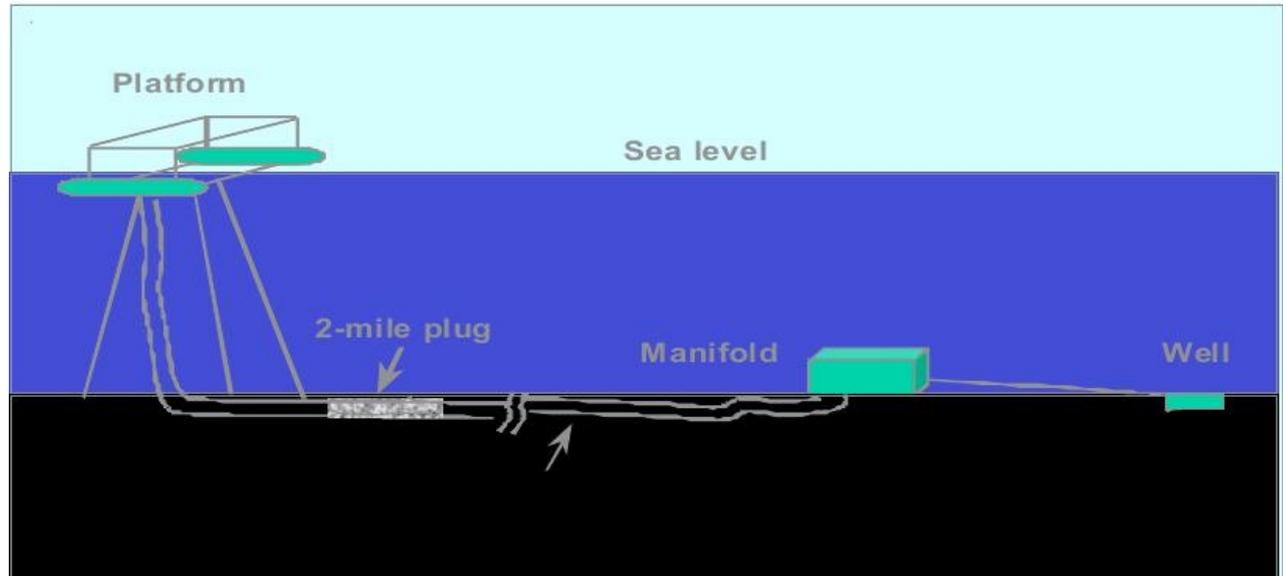


Daniel P. Luis Jiménez, Erik C. Herrera Hernández

Alcione García  
González

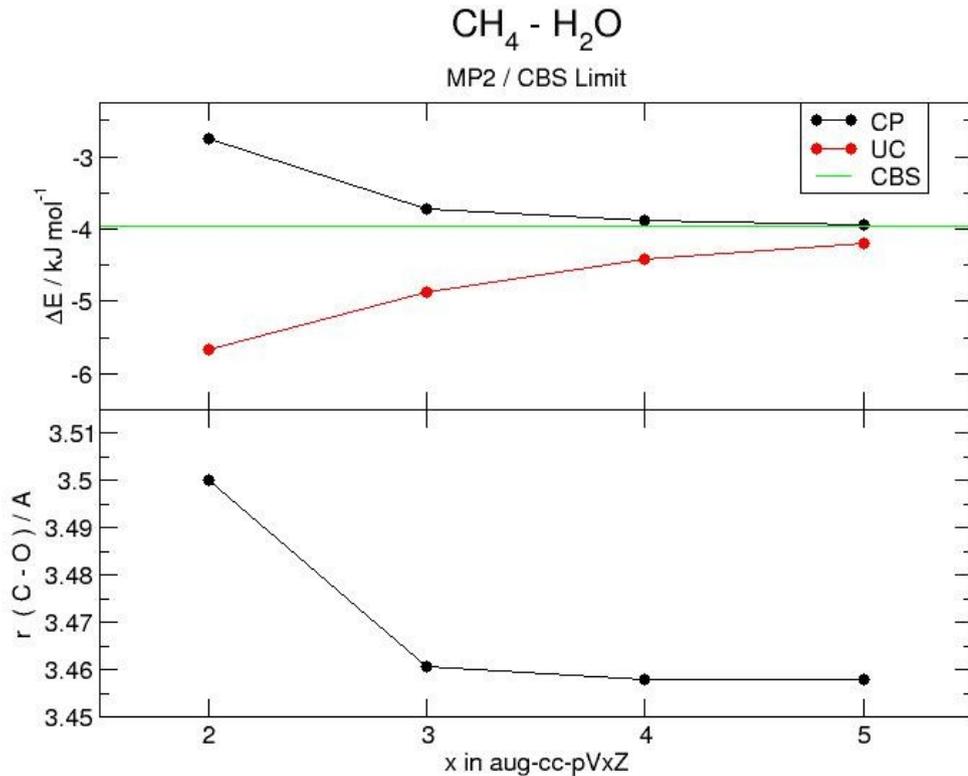


# Motivación... \$\$\$

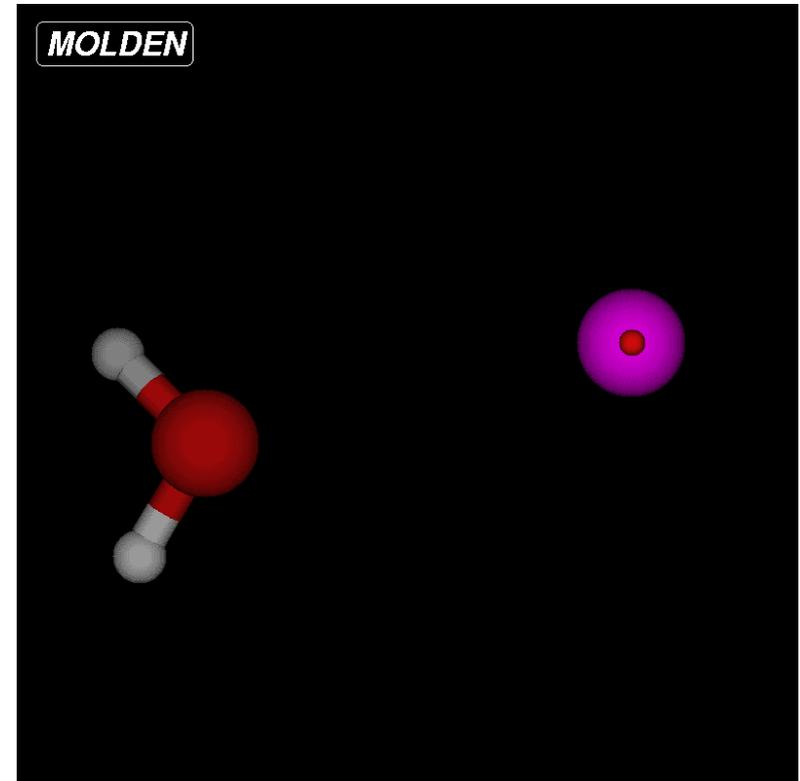


Ref: Lynch, P: Orwell Field, North Sea, (1996)

# La interacción CH<sub>4</sub> - H<sub>2</sub>O

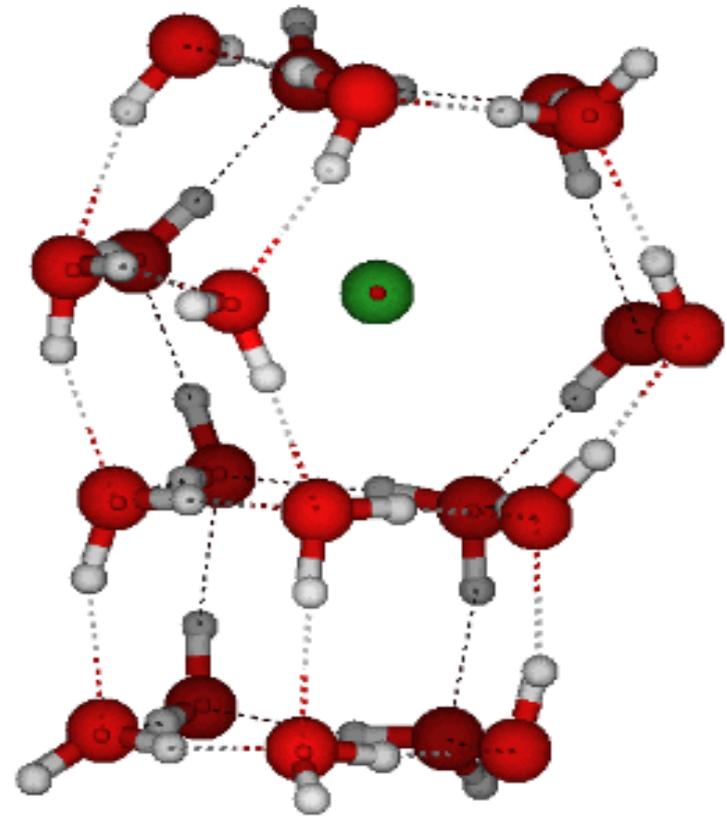
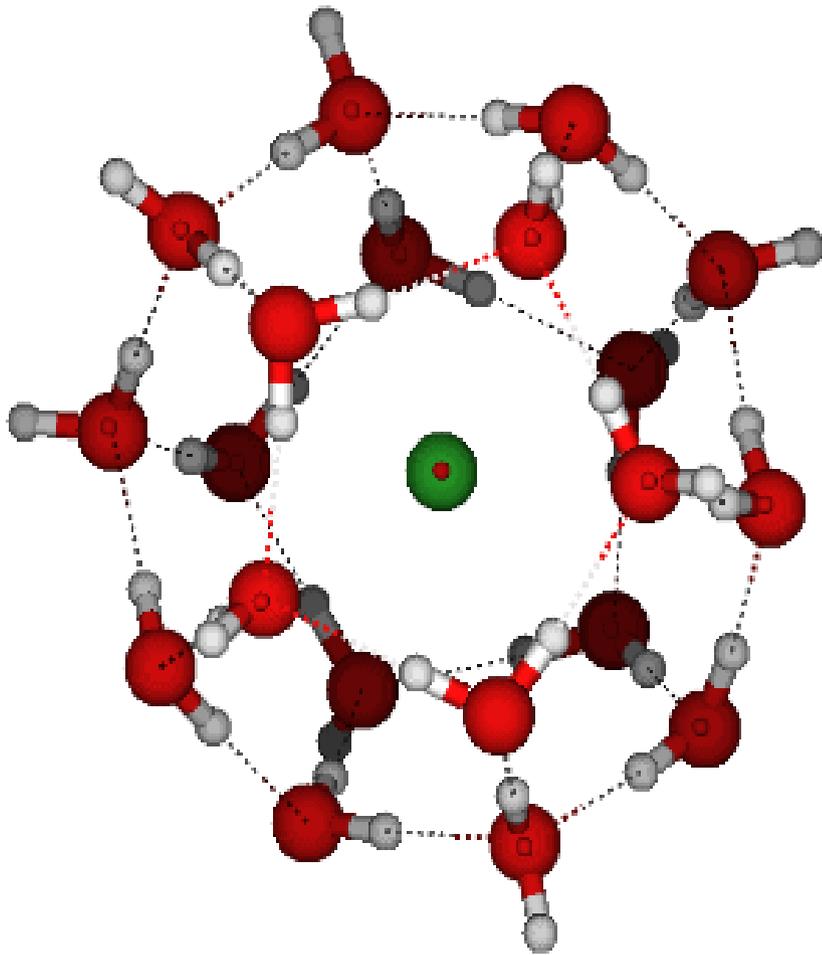


$$\Delta E = -3.94 \text{ kJ mol}^{-1}$$

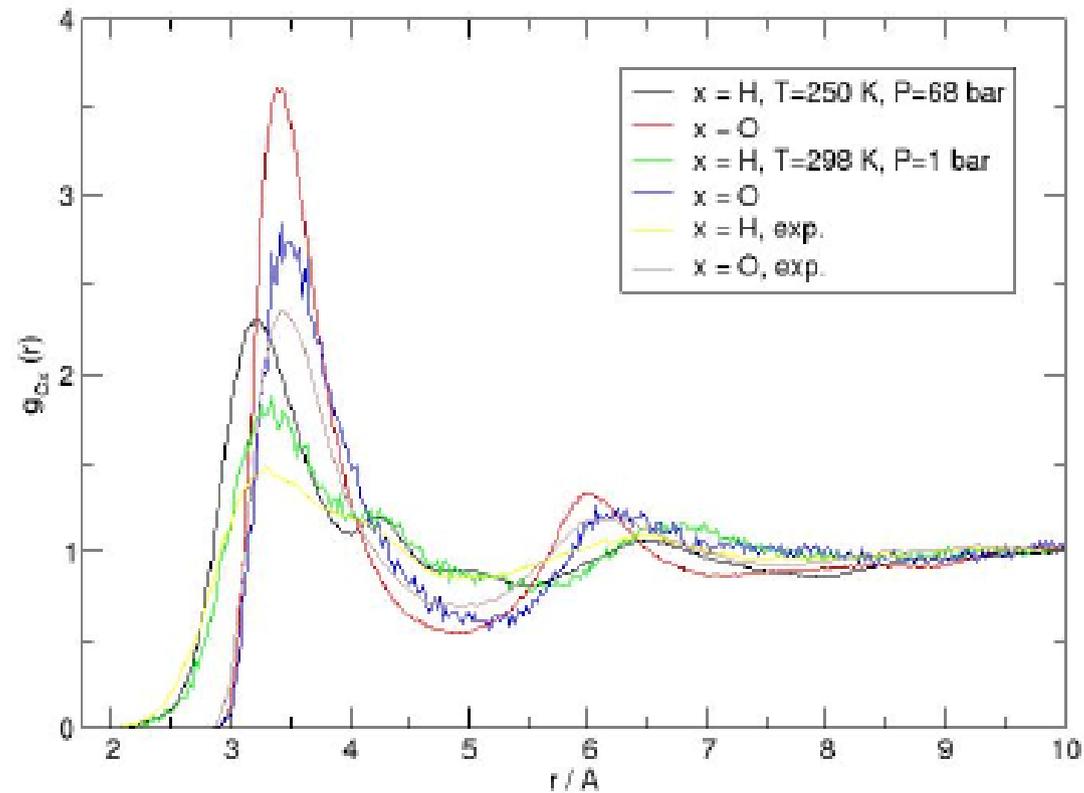


United Atom Model  
 $\alpha = 2.43 \text{ \AA}^3$

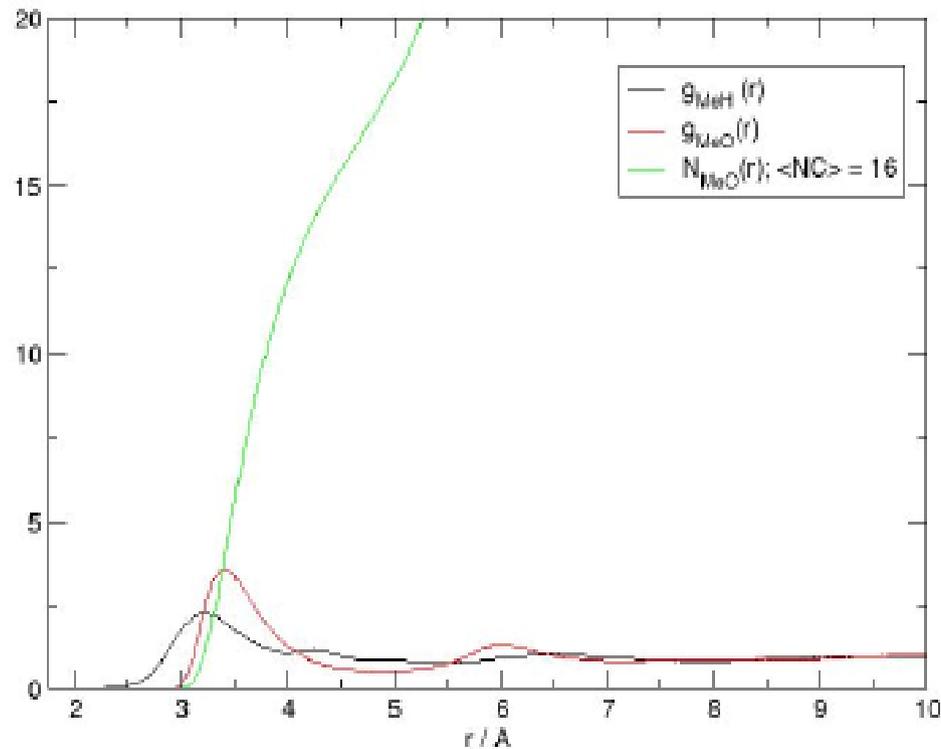
# “Jaulas” $\text{CH}_4-(\text{H}_2\text{O})_{20}$



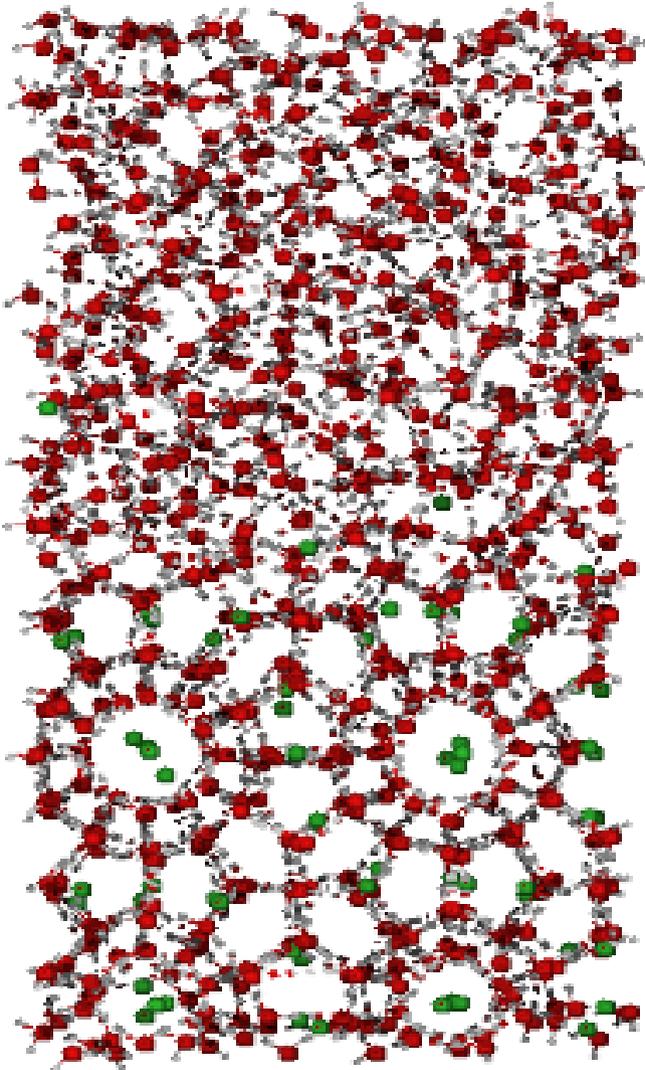
# Simulaciones de la solución acuosa de $\text{CH}_4$



# Que da un número de coordinación



# La coexistencia del hidrato con el agua líquida



El hidrato si

64 moléculas de  $\text{CH}_4$

782 moléculas de  $\text{H}_2\text{O}$  (MCDHO2)

MD con GROMACS

$P = 68$  bar, *semi-isotrópico*

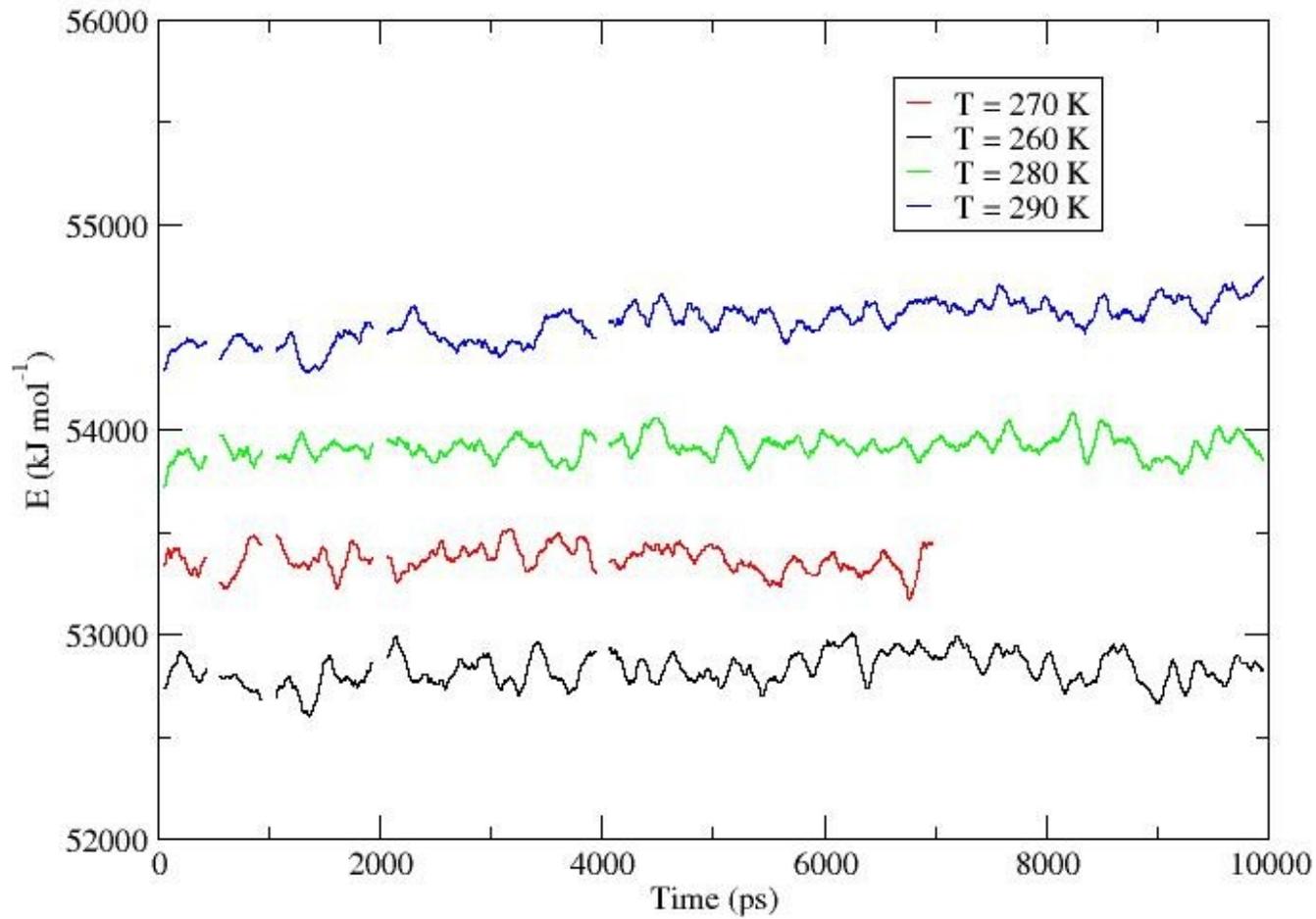
$T = 260$  K, 270 K,  
280 K, 290 K

Electrostática con PME

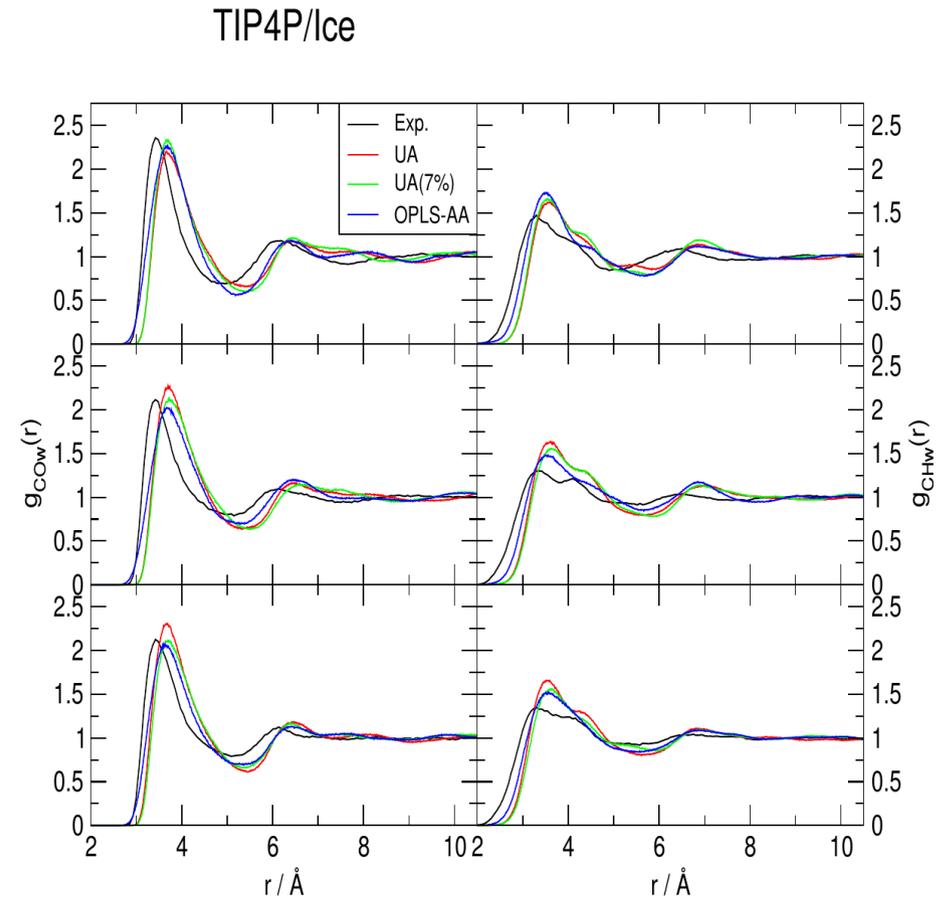
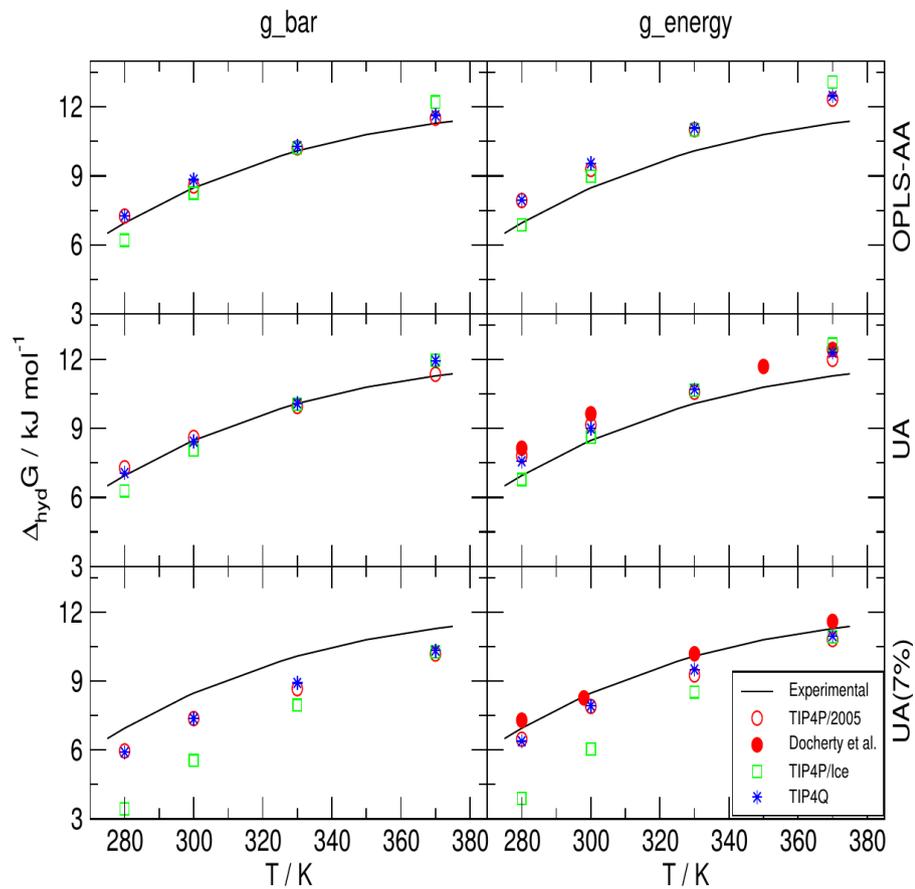
Constricciones flexibles ( $\Delta t = 2$  fs)

# ¿Hubo fusión...?

$E_{\text{pot}}$  vs time



# A volver a probar modelos empíricos



# La densidad y la coordinación

Model	T = 277 K		T = 283 K		T = 291 K	
	$\rho$	$n_H$	$\rho$	$n_H$	$\rho$	$n_H$
2005-1	1007	19.5±2.8	1005	19.9±3.5	1001	19.2±4.1
2005-2	1006	20.0±3.2	1003	19.6±3.2	1003	19.7±3.1
2005-3	1004	19.9±3.4	1004	19.9±2.8	1001	19.5±3.8
Ice-1	996	19.2±2.3	996	19.3±2.6	997	19.4±3.3
Ice-2	996	19.1±2.4	995	19.8±2.6	991	19.7±2.6
Ice-3	1001	19.7±2.5	993	19.7±3.1	998	19.3±3.0
Q-1	1005	19.8±2.6	998	19.6±3.0	1000	19.2±3.2
Q-2	1002	19.8±2.8	1002	20.5±2.6	998	20.0±2.7
Q-3	1000	20.2±2.9	999	20.1±3.0	1000	19.6±3.4

# La coexistencia de tres fases

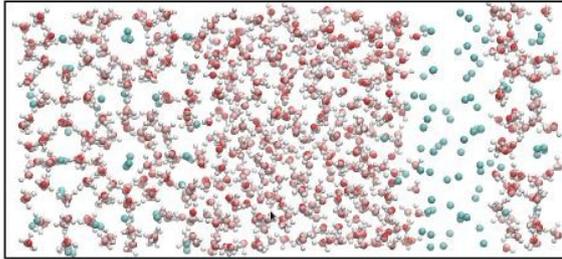


Figure 1: Initial configuration used for all simulations in this work

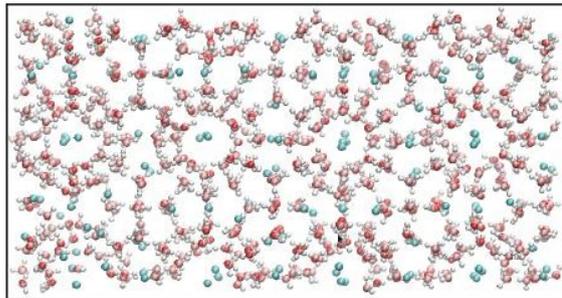
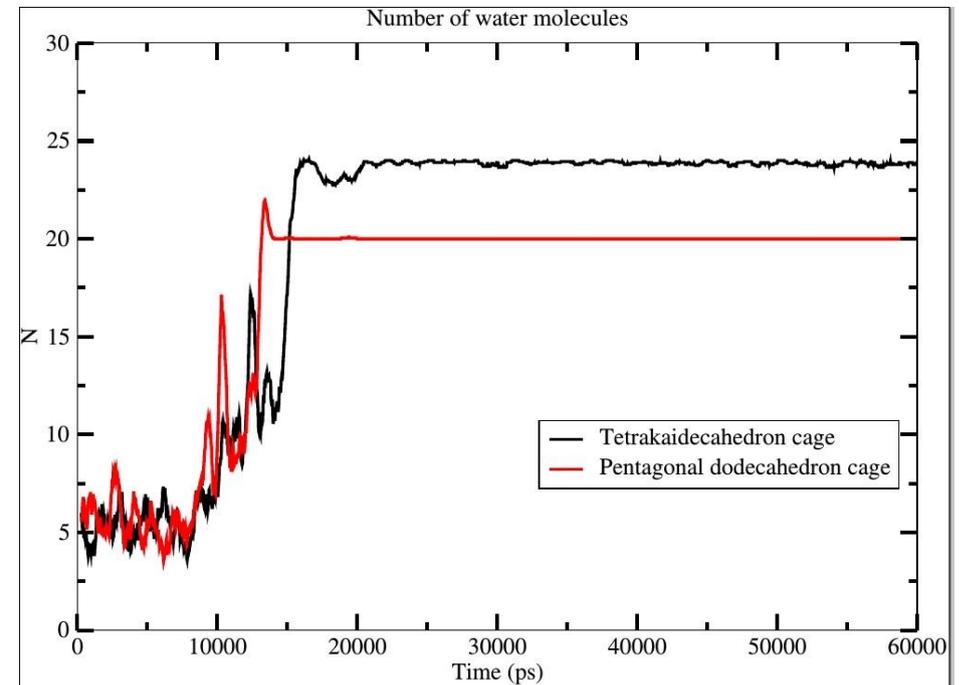
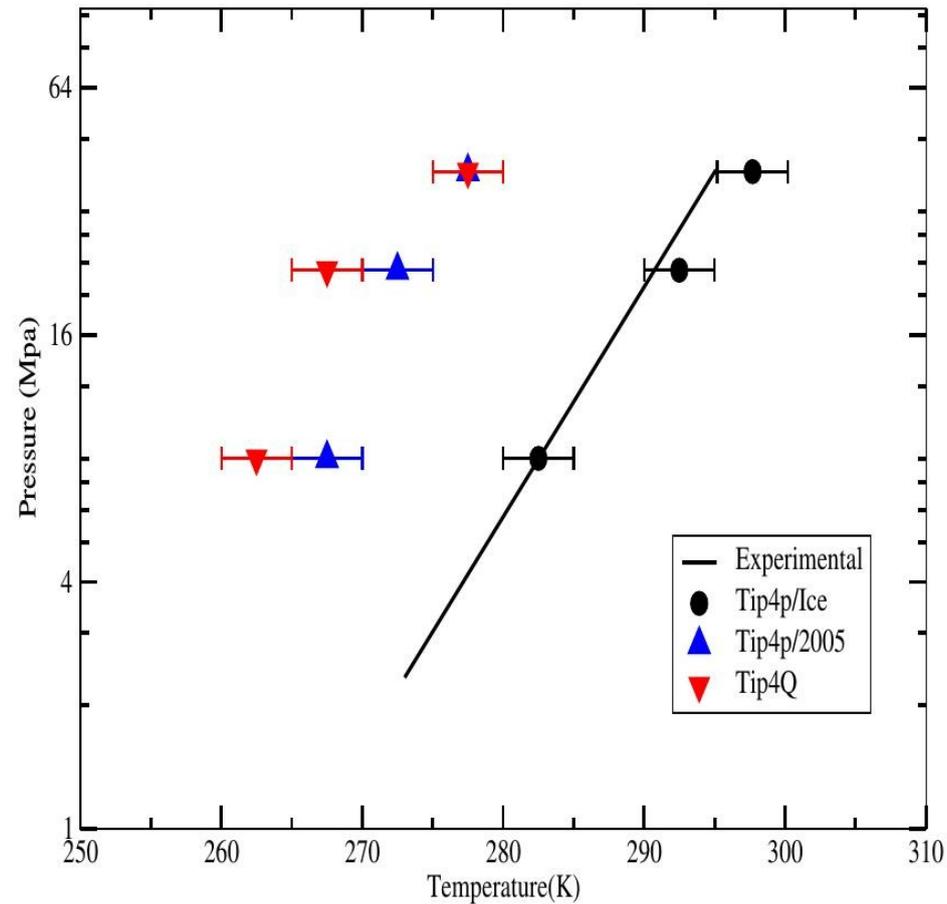


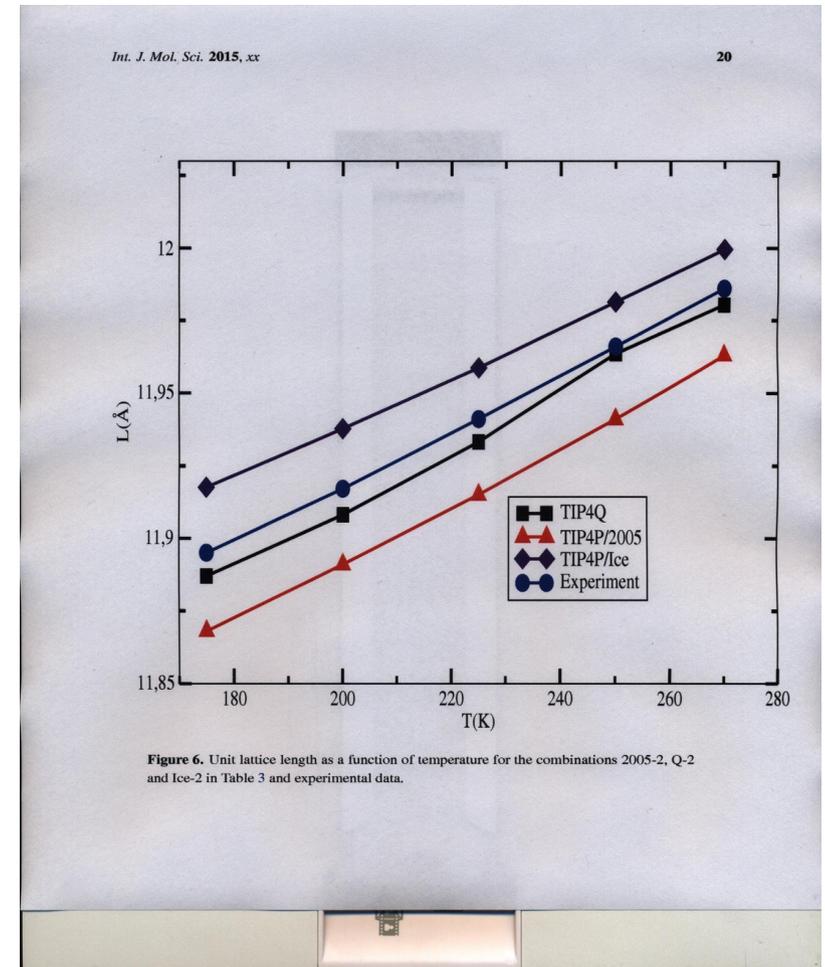
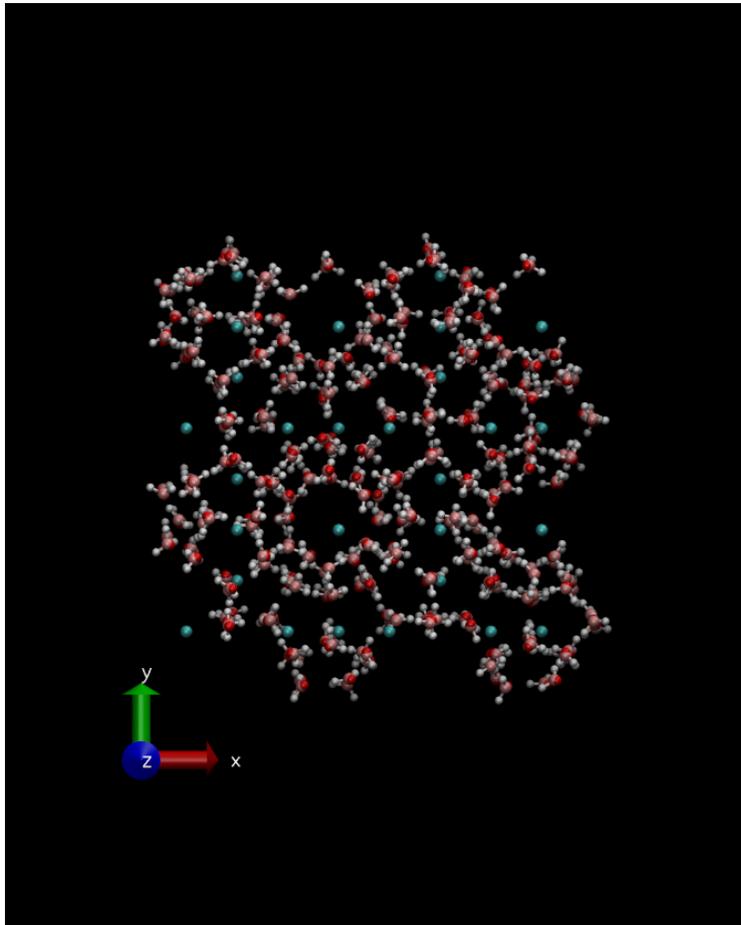
Figure 2: Snapshot of the system crystallized, in this case the potential energy of the system decreased



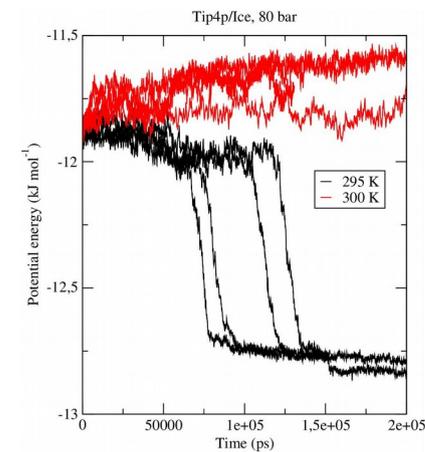
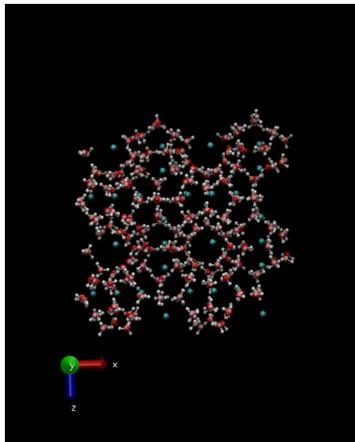
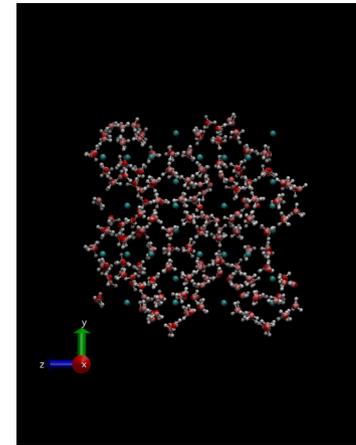
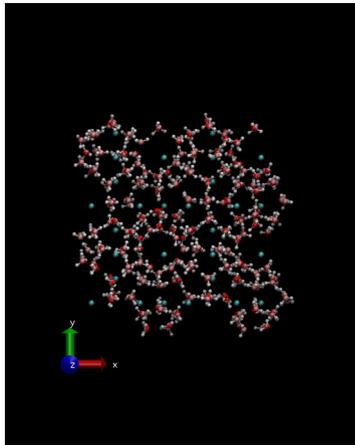
# La comparación con datos experimentales



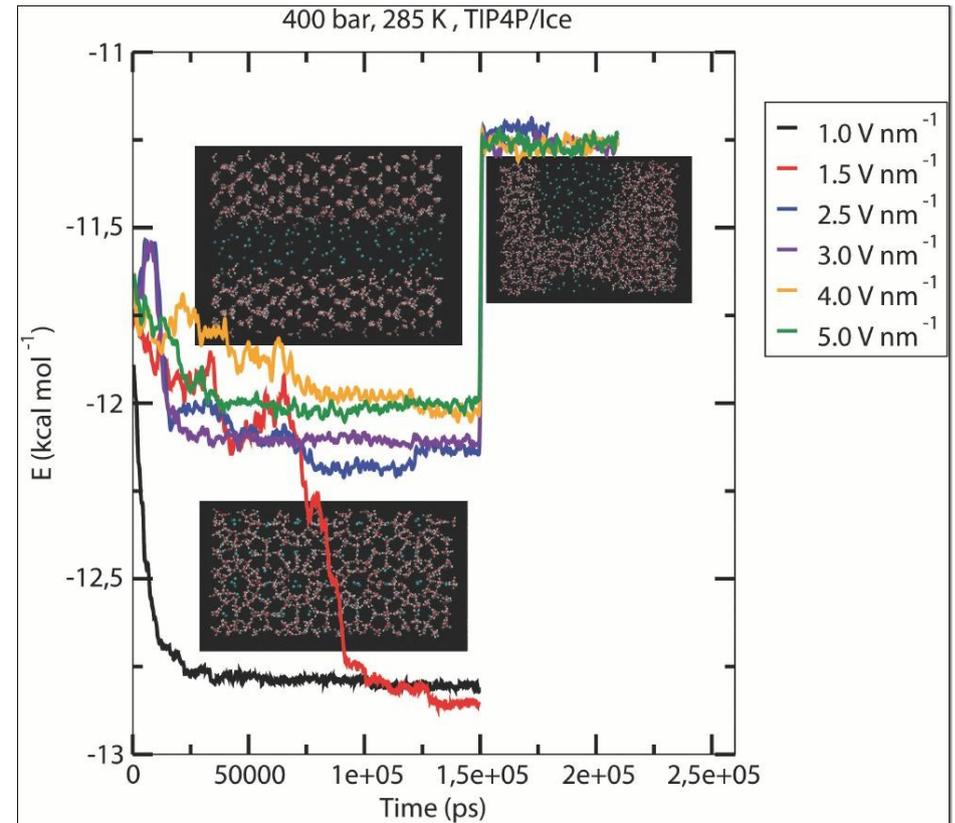
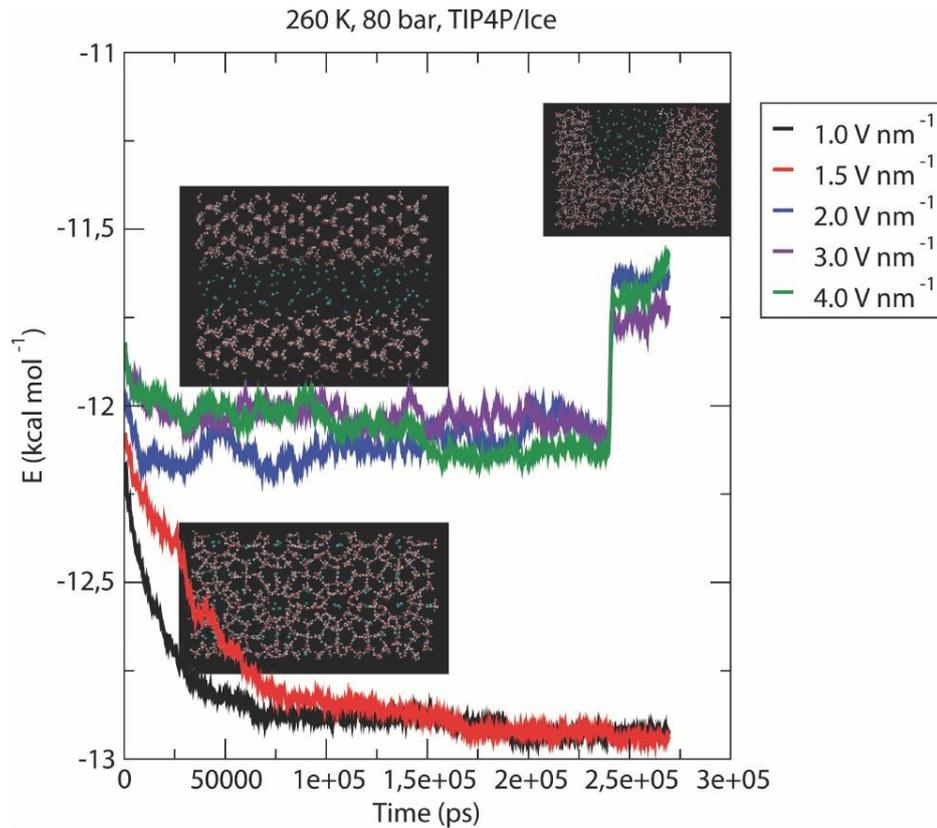
# For the si alone



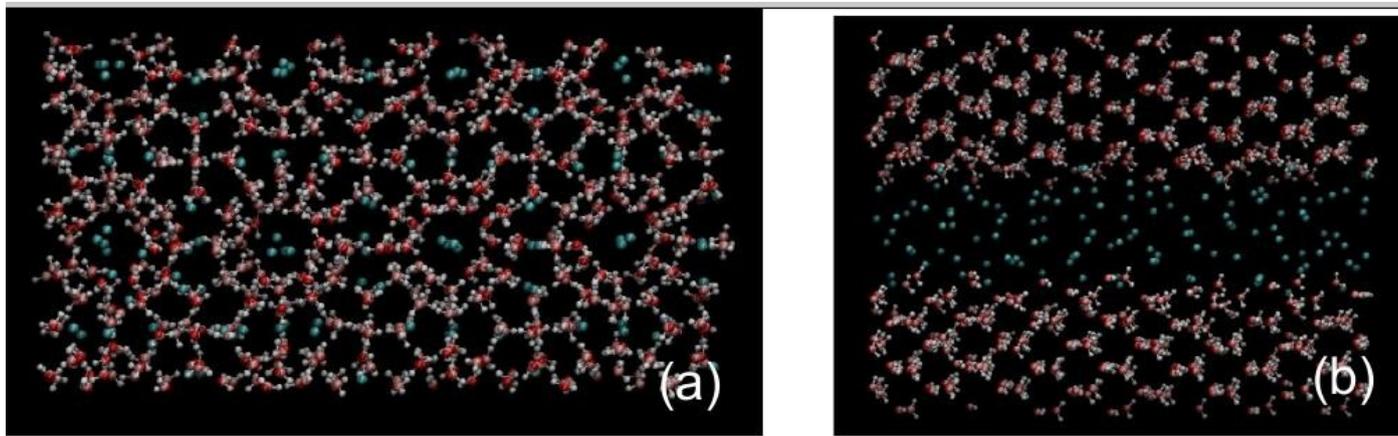
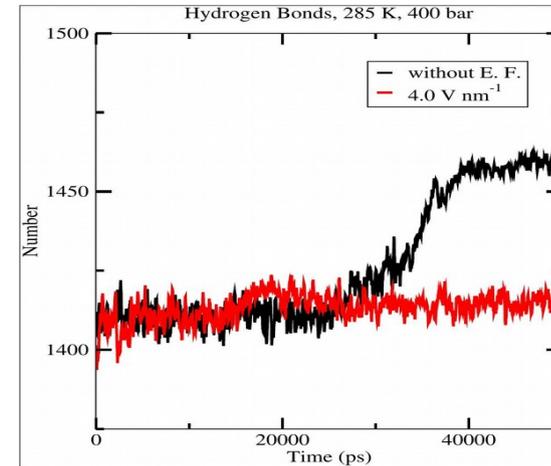
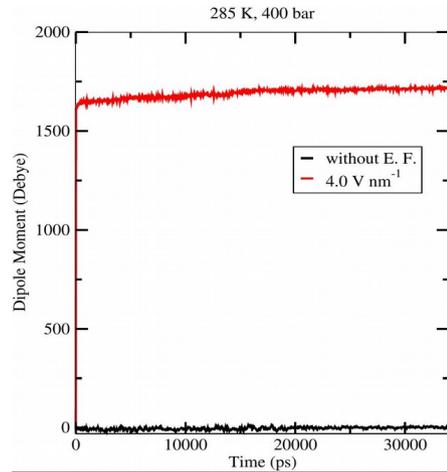
# Coexistencia de tres fases, con diferentes orientaciones



# El efecto de un campo eléctrico externo



# Produce la disociación pasando por una fase muy ordenada

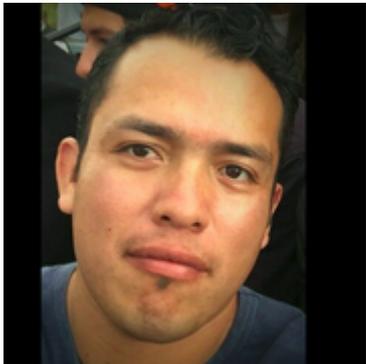


# Comentarios y conclusiones

- Aún no se ha podido ligar los resultados de cálculos ab initio con datos experimentales de la solución acuosa diluida: bajos  $T_m$  y CN. (Int'l. J. Mol. Simulat. 2016)
- Un campo eléctrico externo sí induce la disociación del hidrato de metano sl; pero requiere más de 1.5 V/nm... Un campo de 0.1 V/nm ya produce la ruptura dieléctrica del agua. (J. Chem. Phys. 2015)
- Más recientemente encontramos que con campos de 0.1 V/nm a 1 V/nm se induce un aumento en la temperatura de fusión del hidrato (Mol. Sim. 2016)

# El diagrama de fases de una bicapa de fosfolípidos

- En colaboración con



Fernando Favela Rosales



Mauricio D. Carbajal Tinoco



Iván Ortega Blake



César Millán Pacheco

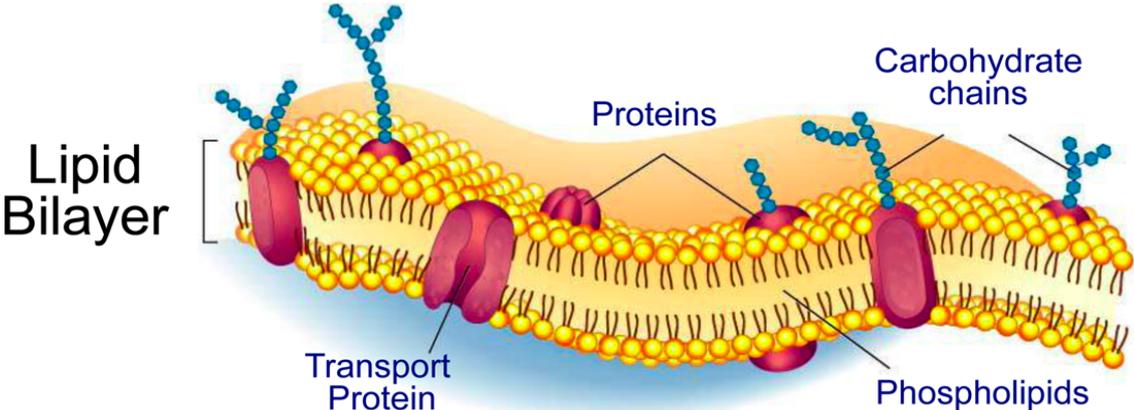


# Traza

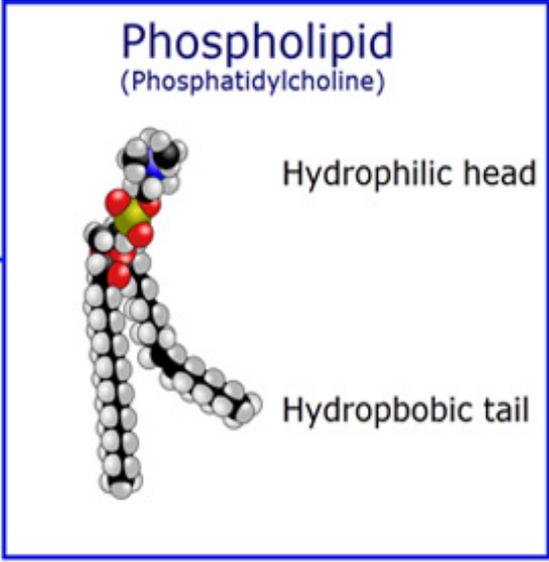
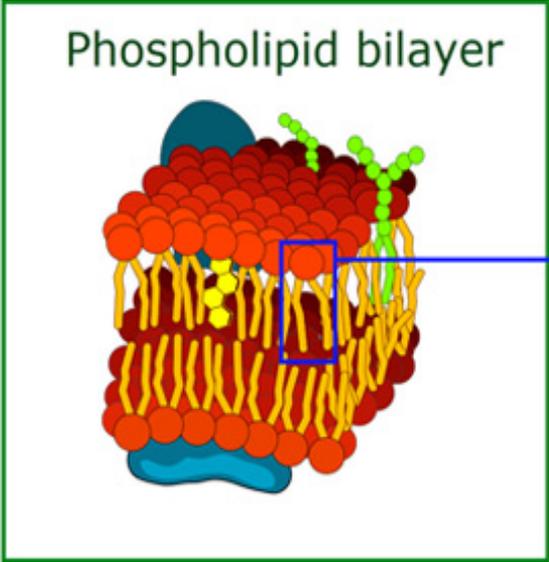
- El mecanismo de acción de la anfotericina-B (AmB)
- El diagrama de fases de POPC-colesterol
- Simulaciones por dinámica molecular
- Resultados
- Conclusiones

# Structure of the Cell Membrane

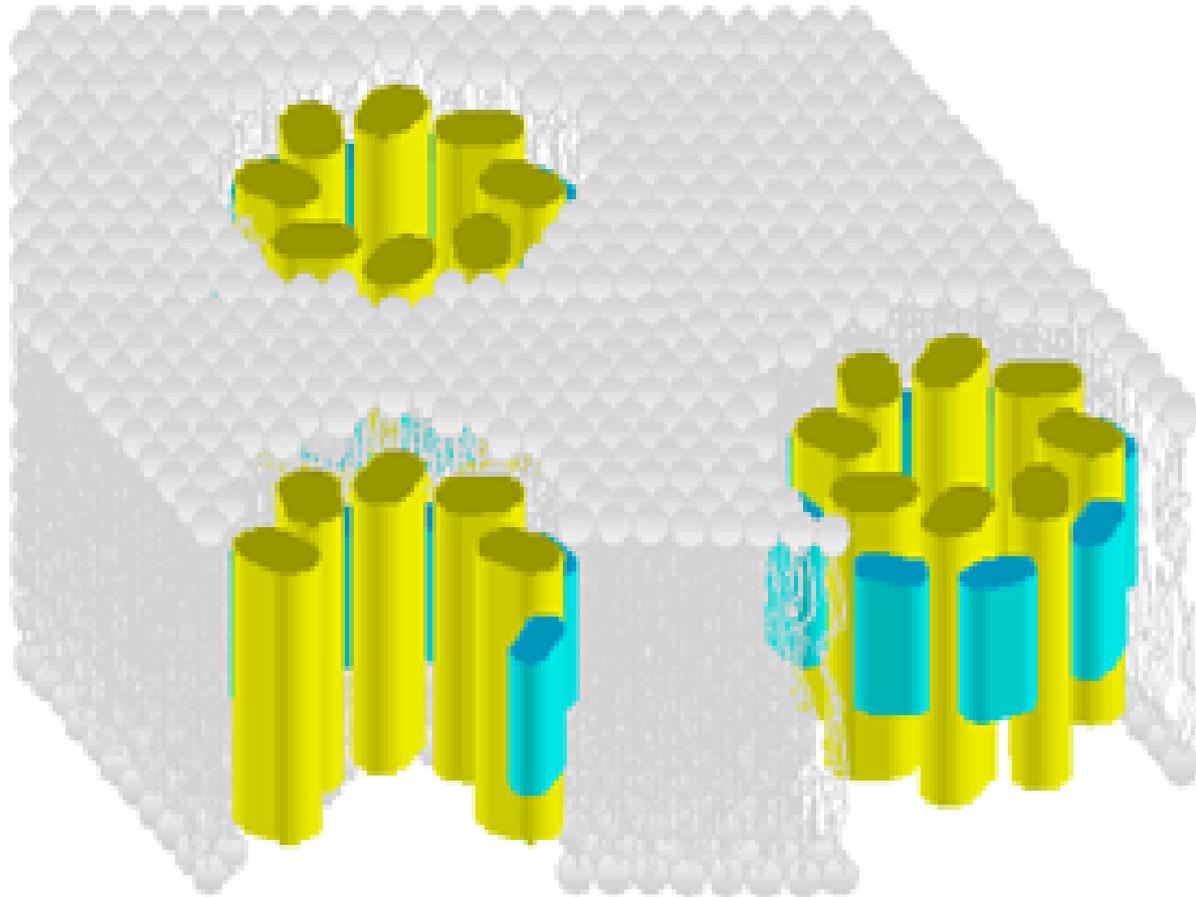
Outside of cell



Inside of cell (cytoplasm)

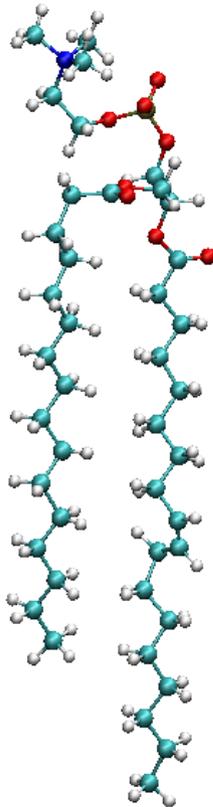


# ¿Cómo se forma el poro de AmB? (El modelo “de barril”)

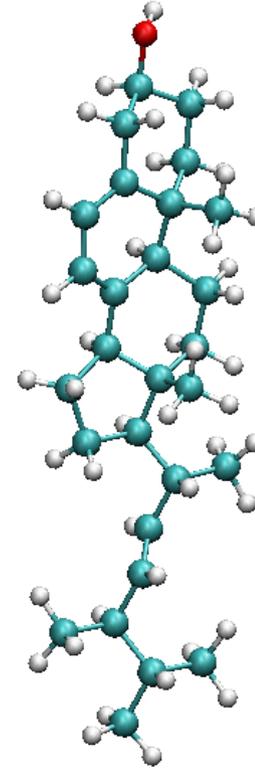


# Las moléculas relevantes

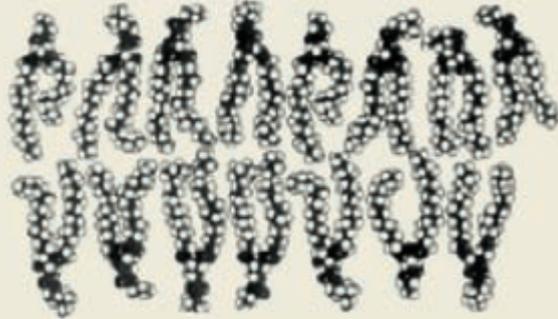
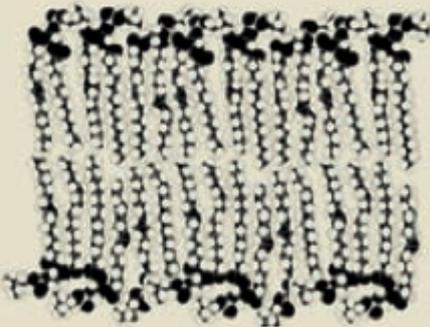
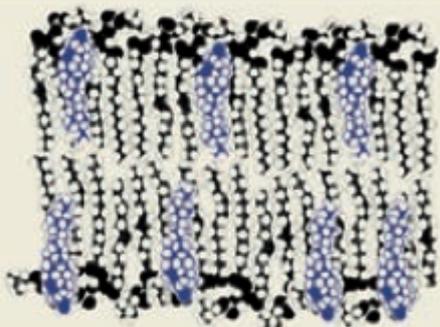
POPC



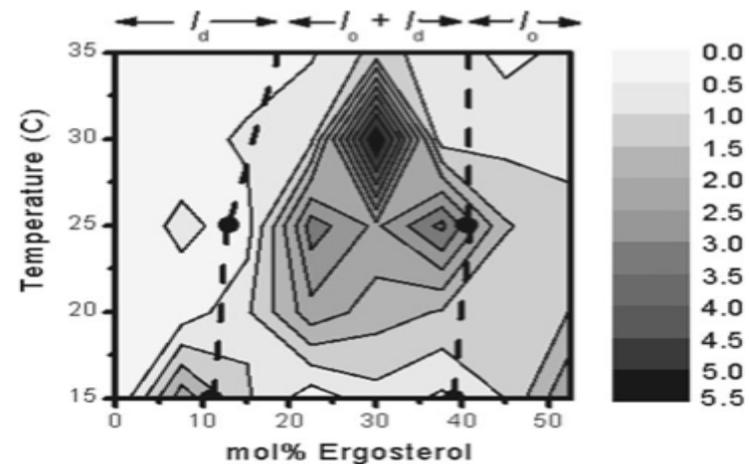
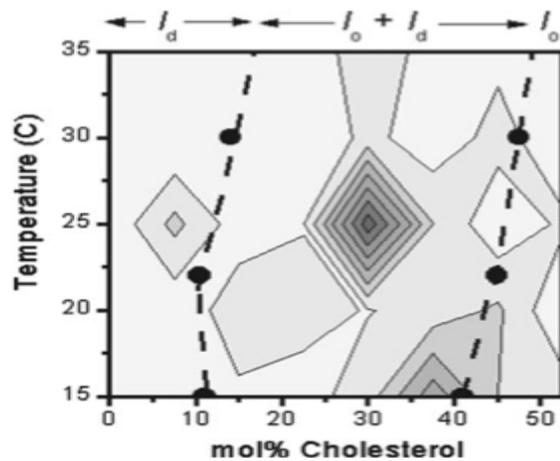
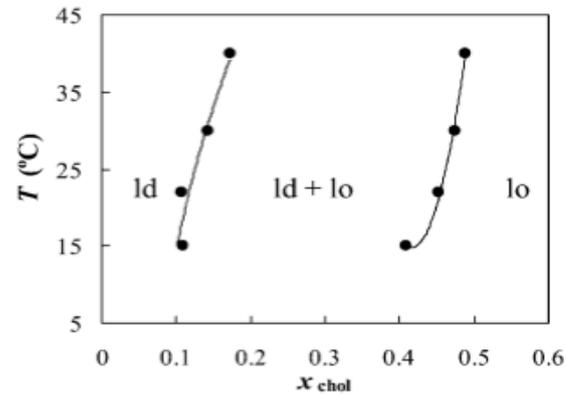
ERGOSTEROL



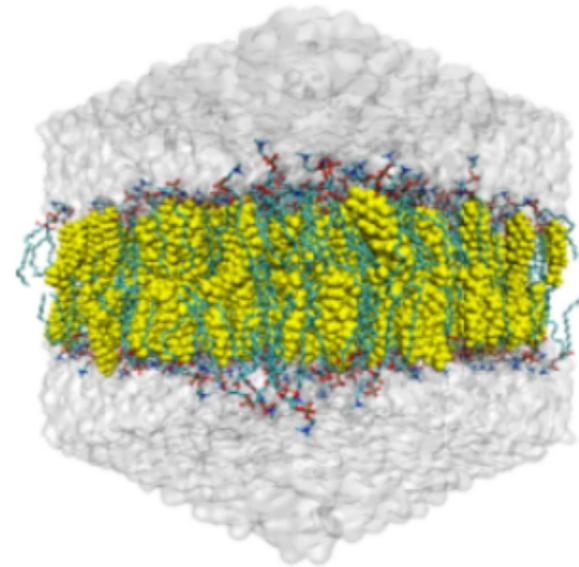
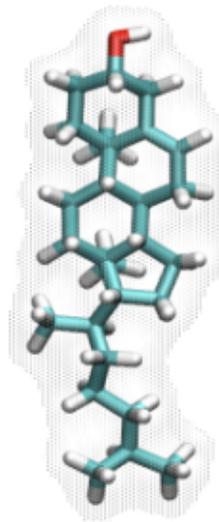
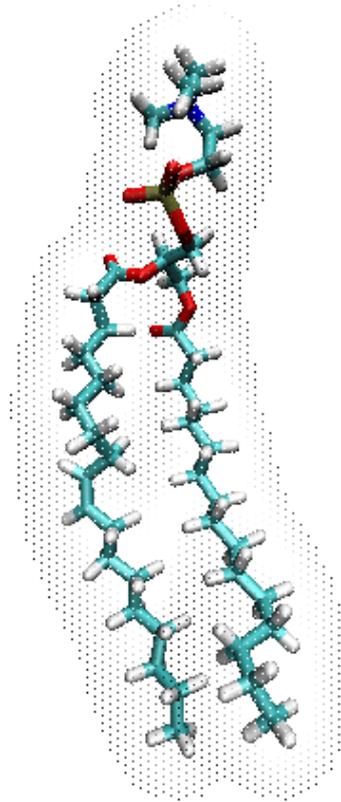
# Con y sin colesterol

	<p>Liquid-crystalline, liquid-disordered <math>L_d</math> (<math>L_d</math> or <math>L_\alpha</math>)</p> <hr/> <p><math>S</math> = Low <math>D_T</math> = Fast (<math>\sim 1 \mu\text{m}^2 \text{s}^{-1}</math>)</p>
	<p>Solid gel <math>s_o</math> (or <math>L_\beta</math>)</p> <hr/> <p><math>S</math> = High <math>D_T</math> = Slow (<math>10^{-3} \mu\text{m}^2 \text{s}^{-1}</math>)</p>
	<p>Liquid-ordered, 'raft' <math>L_o</math> (or <math>L_o'</math>)</p> <hr/> <p><math>S</math> = High <math>D_T</math> = Fast (<math>\sim 1 \mu\text{m}^2 \text{s}^{-1}</math>)</p>

# La actividad de AmB en diferentes fases



# El sistema



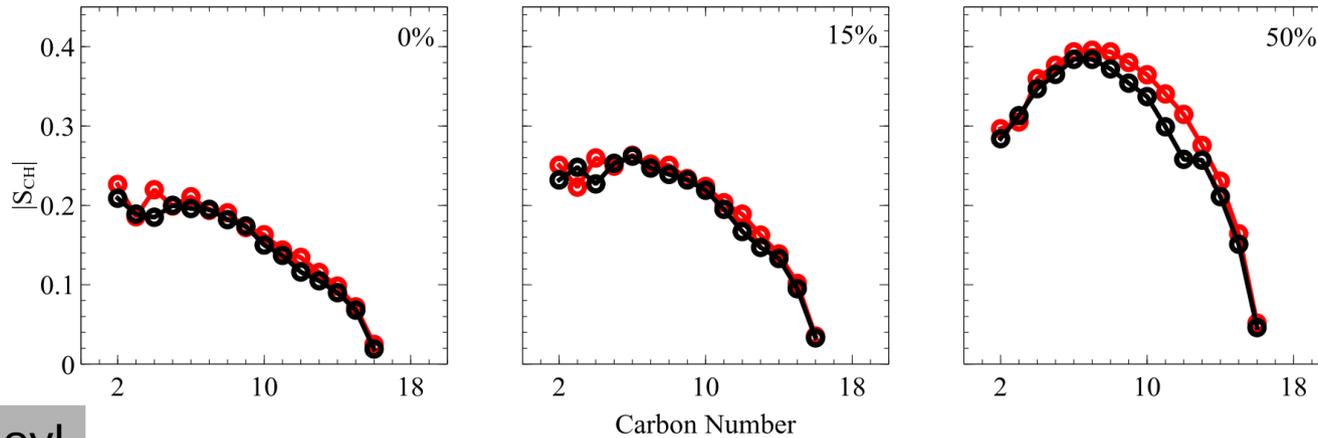
# MD Simulations

All molecular simulations were done at three different temperatures (283, 298 and 308 K) and different cholesterol concentrations varying from 0 to 55% in steps of 5%. All simulations were done using periodic boundary conditions (PBC) and the specific parameters for the potential are detailed below.

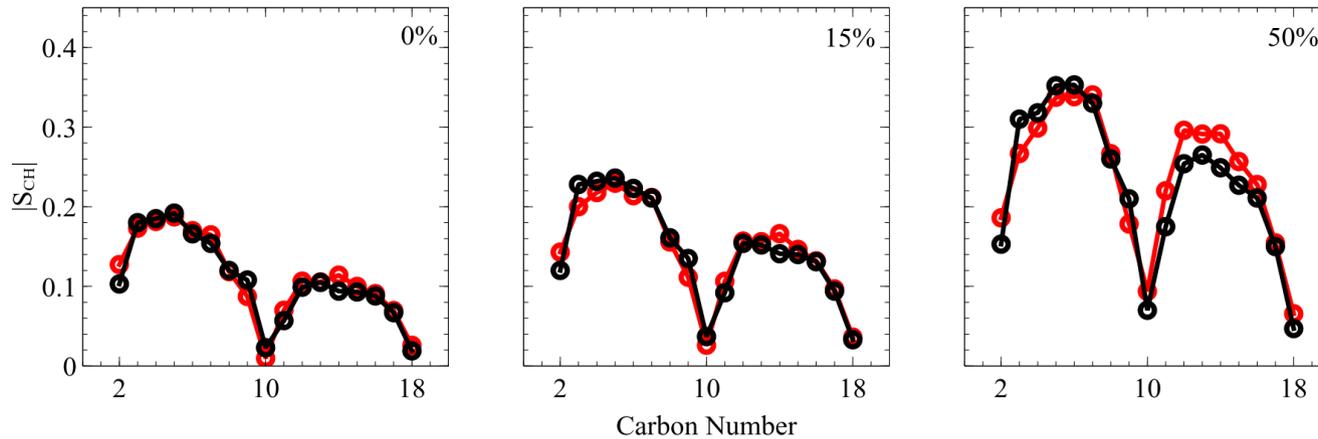
The SLIPIDS Force Field parameters [2] were used for POPC and cholesterol. 512 POPC lipids (256 per leaflet) were used for the initial concentration and they were subsequently substituted by cholesterol molecules to fulfil the desired concentration. Pressure coupling was made using Parrinello-Rahman and Temperature coupling using the Nose-Hoover thermostat. PME was used for electrostatics. All the systems were simulated using the GROMACS 4.6 version.

# Order parameters

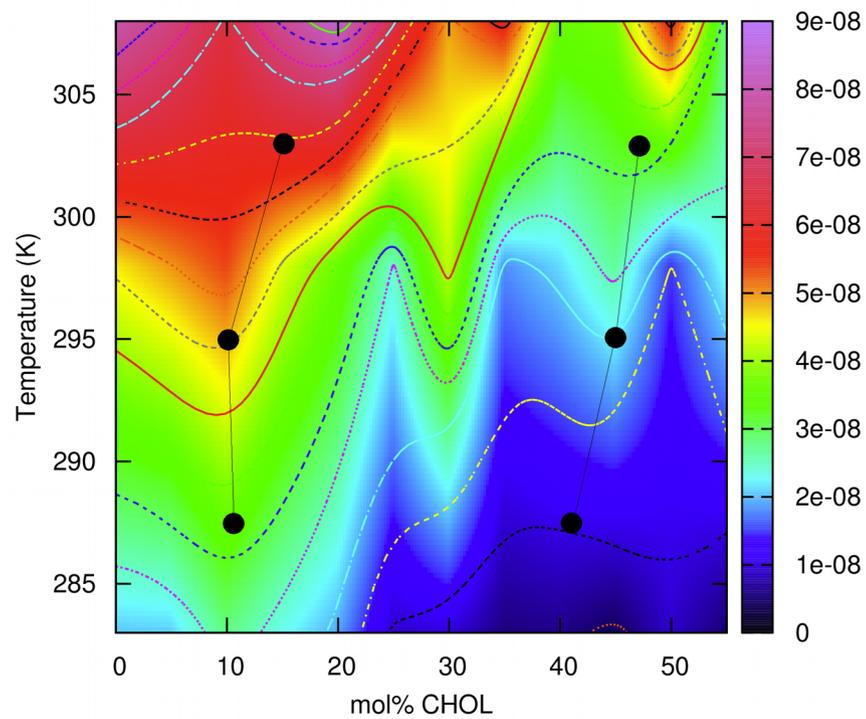
## SNI Palmitoyl



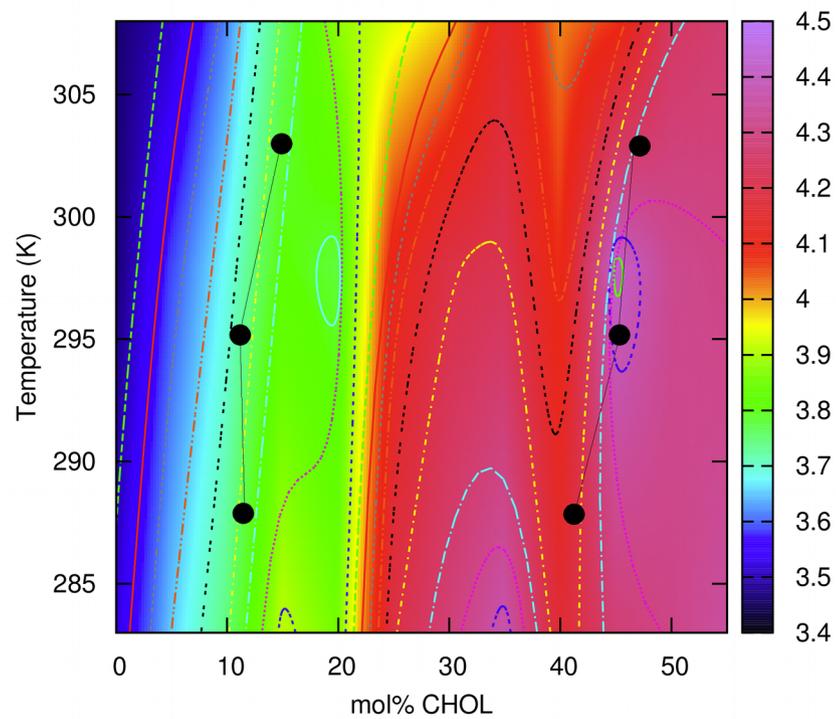
## SN2 Oleoyl



# La difusión lateral ( $\text{cm}^2/\text{s}$ )



# El espesor de la bicapa (nm)



# La solubilidad de la sal NaCl

- En colaboración con



José Alejandro (aka "The Driving Force")



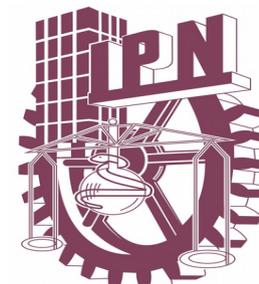
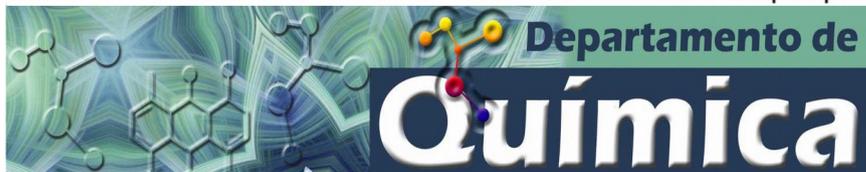
Raúl Fuentes Ázcatl



Héctor M. Manzanilla Granados



 UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
Casa abierta al tiempo Unidad Iztapalapa



# Diferentes configuraciones para la coexistencia

## Direct Coexistence Methods to Determine the Solubility of Salts in Water from Numerical Simulations. Test Case NaCl

Héctor M. Manzanilla-Granados,<sup>†</sup> Humberto Saint-Martín,<sup>‡,||</sup> Raúl Fuentes-Azcatl,<sup>¶</sup> and José Alejandro<sup>\*,§</sup>

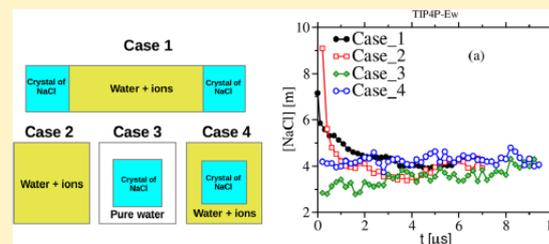
<sup>†</sup>Escuela Superior de Cómputo del I.P.N, Av. Juan de Dios Bátiz s/n Miguel Othón de Mendizabal, 07738 México, D.F., México

<sup>‡</sup>Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 48-3, Cuernavaca, Morelos C.P. 62251, México

<sup>¶</sup>Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Caixa Postal 15051, CEP 91501-970, Porto Alegre, RS Brazil

<sup>§</sup>Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, C.P. 09340 México, D.F., México

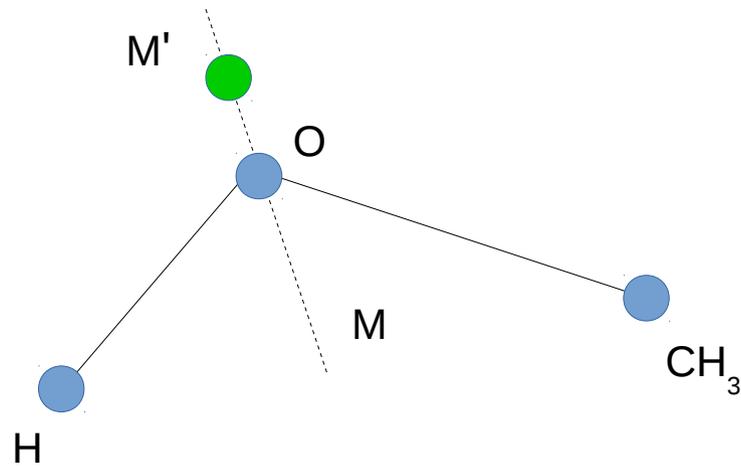
**ABSTRACT:** The solubility of NaCl, an equilibrium between a saturated solution of ions and a solid with a crystalline structure, was obtained from molecular dynamics simulations using the SPC/E and TIP4P-Ew water models. Four initial setups on supersaturated systems were tested on sodium chloride (NaCl) solutions to determine the equilibrium conditions and computational performance: (1) an ionic solution confined between two crystal plates of periodic NaCl, (2) a solution with all the ions initially distributed randomly, (3) a nanocrystal immersed in pure water, and (4) a nanocrystal immersed in an ionic solution. In some cases, the equilibration of the system can take several microseconds. The results from this work showed that the solubility of NaCl was the same, within simulation error, for the four setups, and in agreement with previously reported values from simulations with the setup (1). The system of a nanocrystal immersed in supersaturated solution was found to equilibrate faster than others. In agreement with laser-Doppler droplet measurements, at equilibrium with the solution the crystals in all the setups had a slight positive charge.



# El metanol como anticongelante

- Con Manuel Martínez Jiménez (PCF)
-

## TIP4P/ $\epsilon$ para MeOH

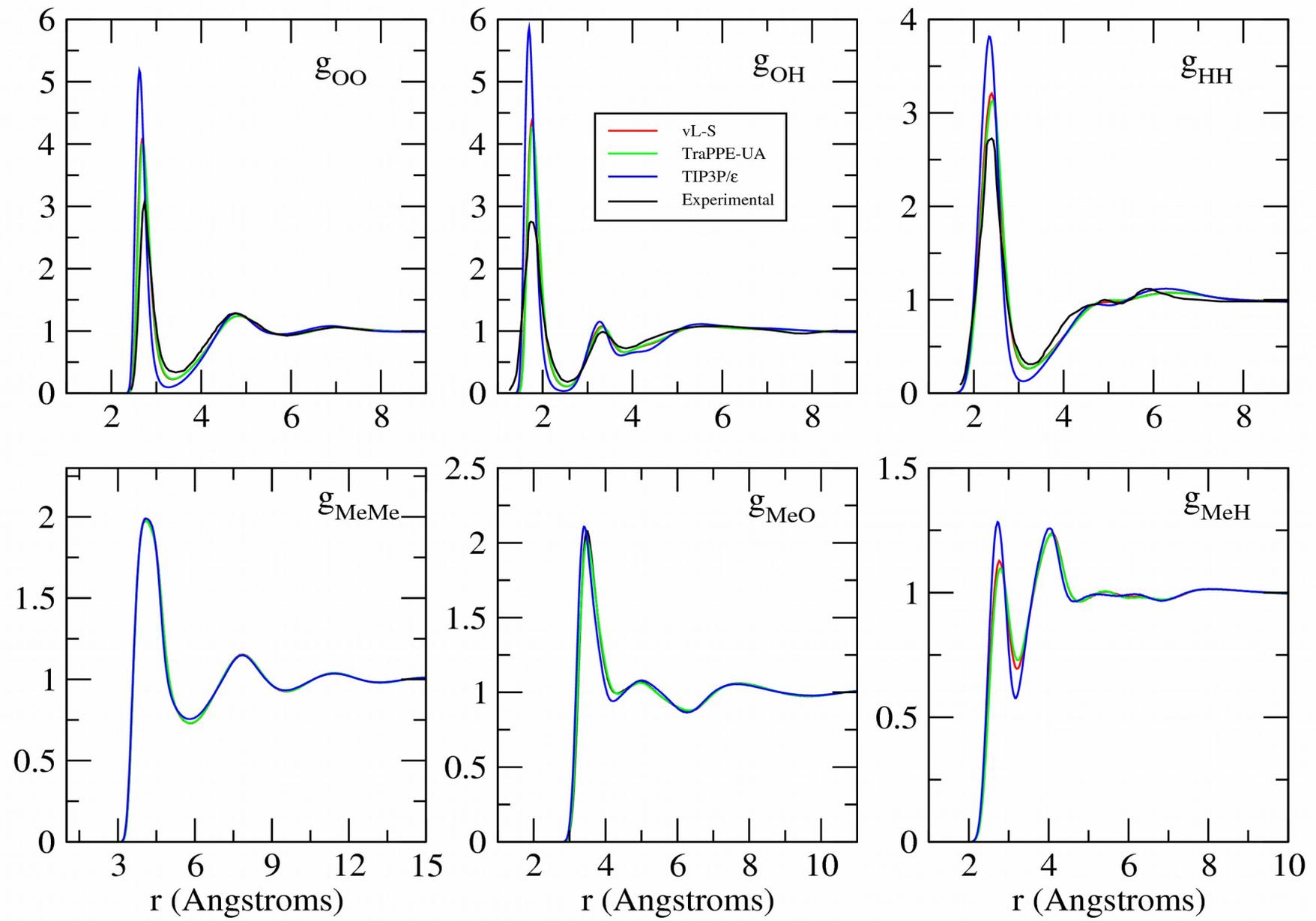


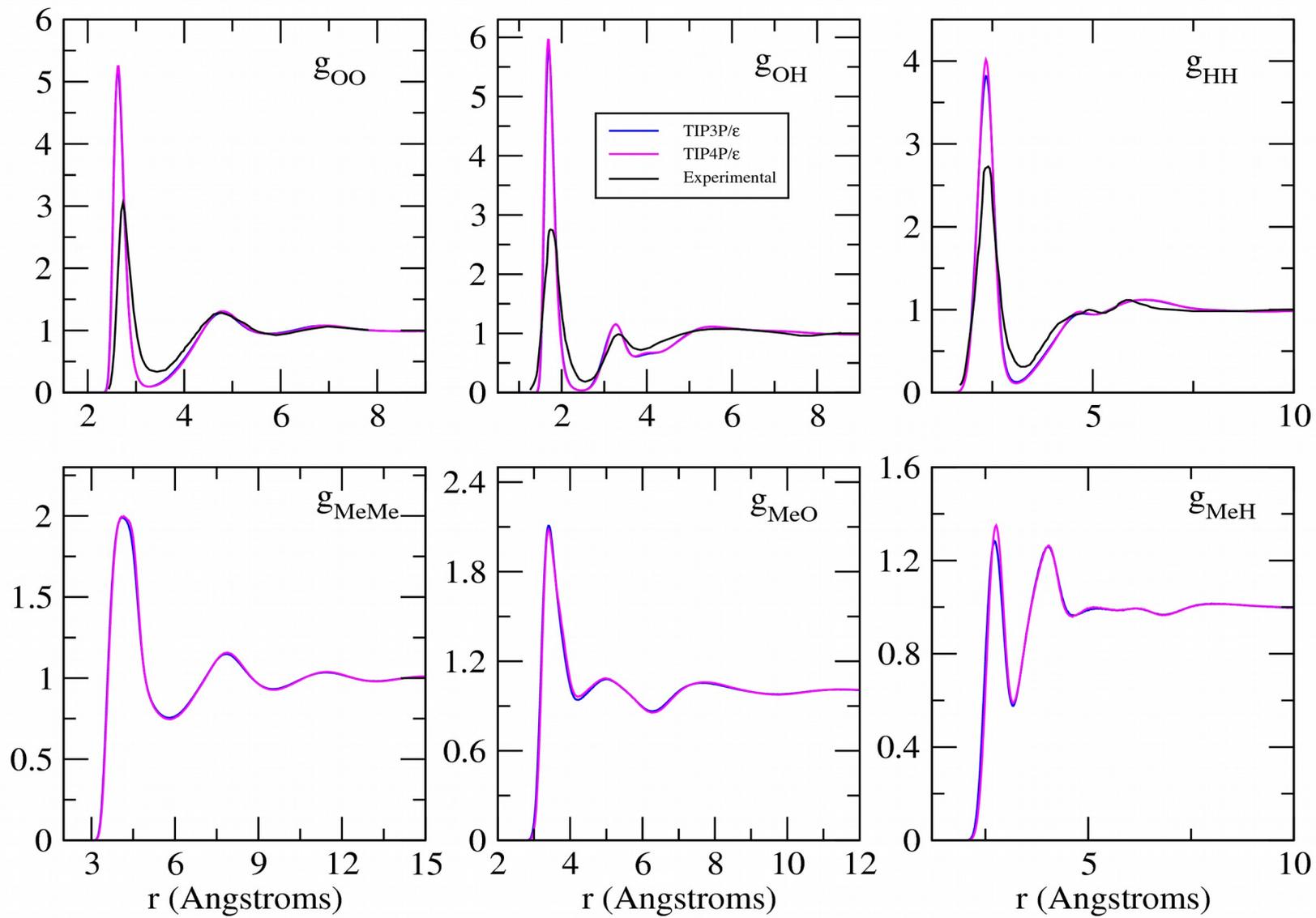
## Propiedades objetivo

- Constante dieléctrica ( $\epsilon=31.5$  a 298.15 K)
- Tensión superficial ( $\gamma= 22.1 \times 10^{-3}$  N/m a 298.15 K)
- Densidad ( $\rho=786.6$  kg/m<sup>3</sup> a 298.15 K)

Modelo	$l(\text{O-H})$ (Å)	$l(\text{O-Me})$ (Å)	$\gamma$ (°)	$\kappa_{\theta}$	$q(\text{O})$ (e)	$q(\text{H})$ (e)	$q(\text{CH}_3)$ (e)	$\sigma(\text{O})$ (Å)	$\epsilon(\text{O})$ (kJ/mol)	$\sigma(\text{CH}_3)$ (Å)	$\epsilon(\text{CH}_3)$ (kJ/mol)
Leeuwen_Smit	0.9451	1.4246	108.53	-----	-0.700	0.435	0.265	3.03	0.7192	3.74	0.8747
TraPPE-UA	0.9450	1.4300	108.50	460.62	-0.700	0.435	0.265	3.02	0.7732	3.75	0.8148
TIP3P/ $\epsilon$	0.9450	1.4300	108.50	460.67	-0.749	0.465	0.284	3.02	0.6960	3.75	0.7334
TIP4P/ $\epsilon$	0.9581	1.4183	108.48	-----	-0.6318	0.3844	0.2474	3.026	0.7345	3.758	0.7741

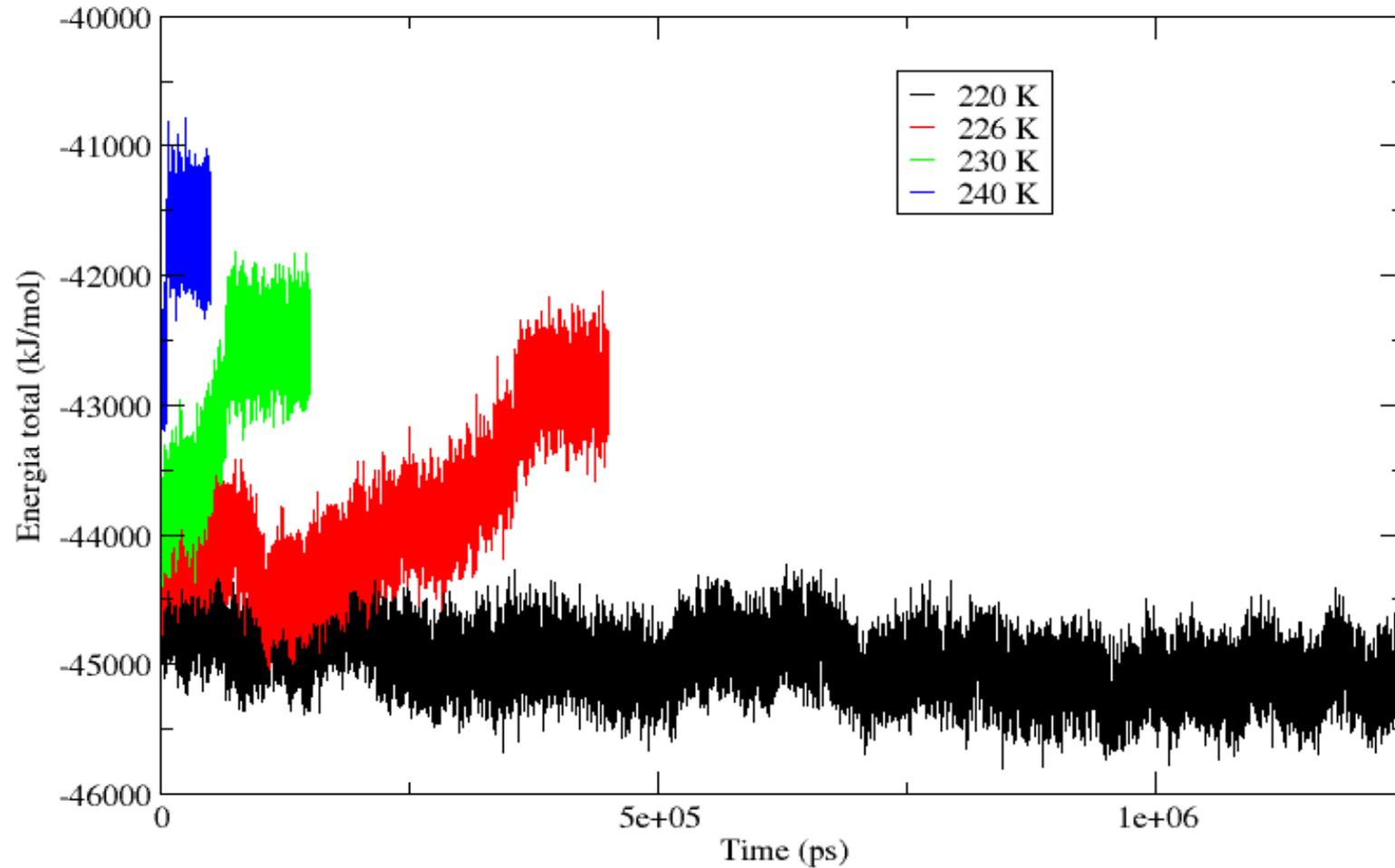
# Funciones de distribución radial



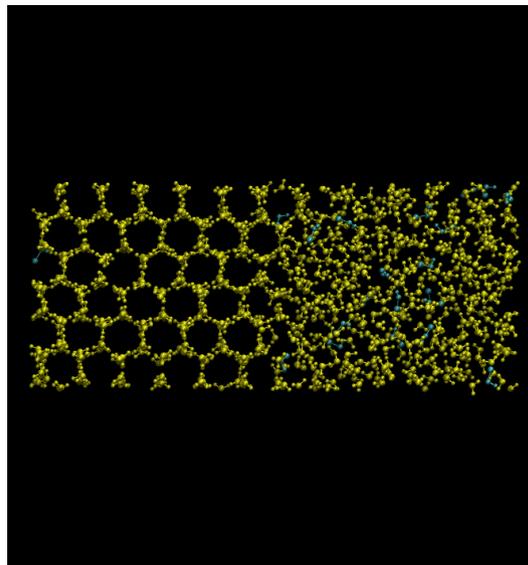
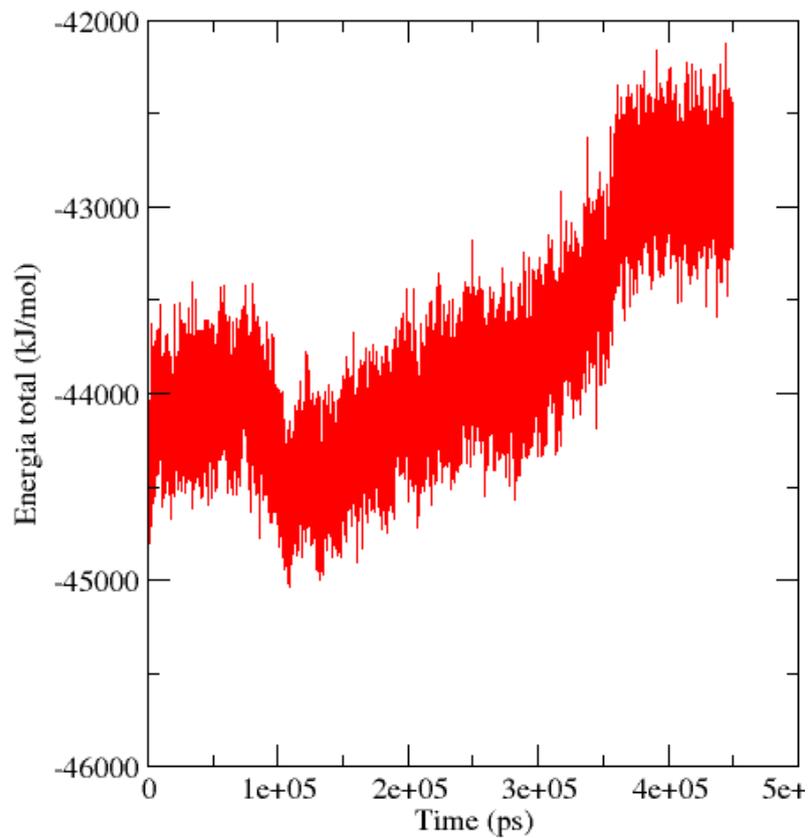


# Cálculo de la temperatura de fusión

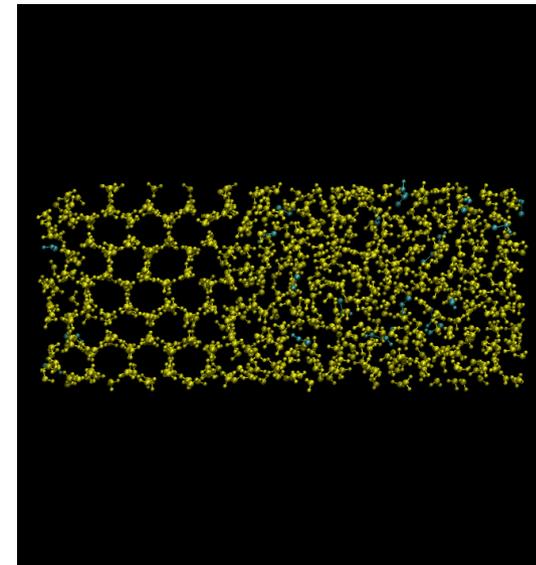
H<sub>2</sub>O-MeOH (435 moléculas total, X<sub>m</sub>=0.05, p=1 bar)



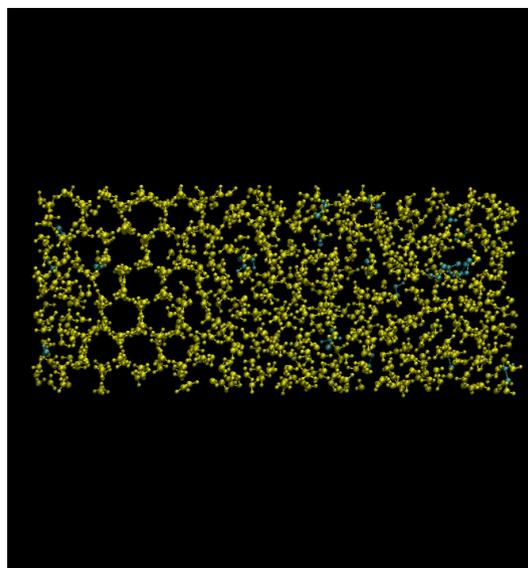
226 K



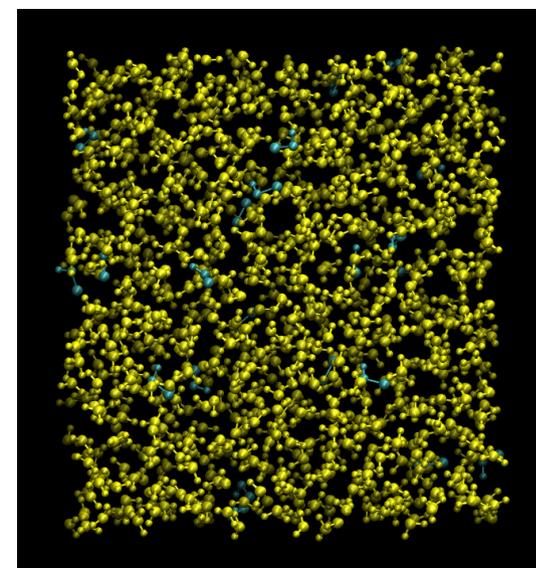
0 ns



300 ns



350 ns



450 ns

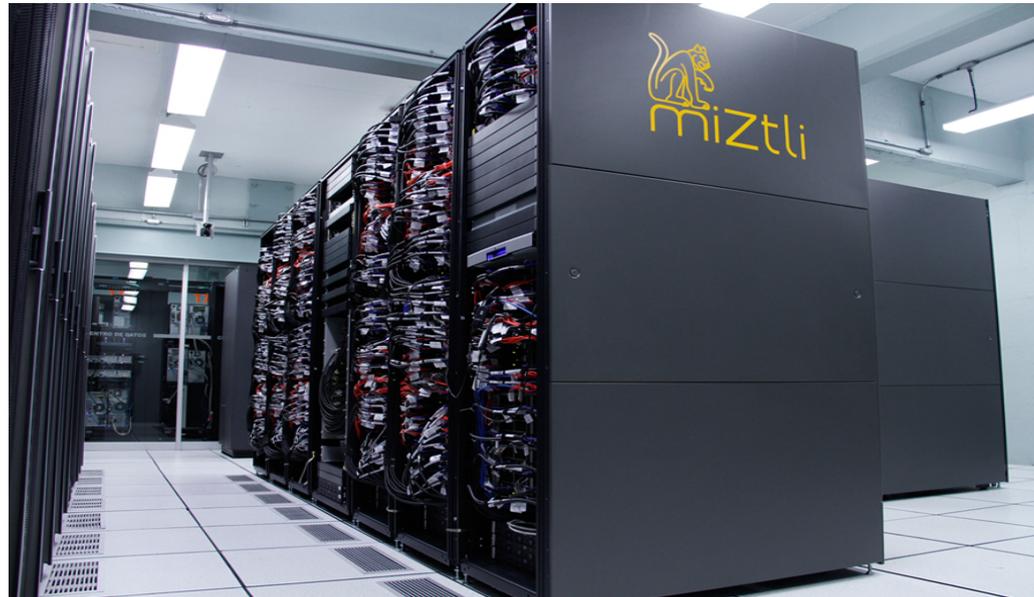
# Agradecimientos



Universidad Nacional  
Autónoma de México

DGTIC

supercómputo  
en la unam



Universidad Nacional  
Autónoma de México

dgapa

Dirección General de Asuntos  
del Personal Académico

# Agradecimientos

**A ustedes por su atención  
(a la hora de los clavados)**

# Cosmología Observacional y Estadística

J. Alberto Vázquez<sup>1,2,\*</sup> and Luis E. Padilla<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, 62210 Cuernavaca, Morelos, México*

<sup>2</sup>*Departamento de Física, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, AP 14-740, Ciudad de México 07000, México*

Uno de los objetivos más desafiantes de la cosmología moderna ha sido la explicación de la expansión acelerada del Universo. El mejor modelo hasta ahora propuesto presupone la validez de la teoría de la Relatividad General de Einstein, sin embargo, con la introducción de una nueva componente de propiedades ‘exóticas’, llamada energía oscura. En este artículo se presenta una introducción sobre las propiedades que describen el Universo observable. Así mismo se da una breve revisión de la conexión existente entre la teoría y algunas observaciones cosmológicas, dada a través de la estadística Bayesiana.

## I. INTRODUCCIÓN

En este artículo se revisan los fundamentos básicos de la Cosmología de alta precisión. En las secciones II y III se introducen las ecuaciones básicas que rigen la dinámica de nuestro Universo y la geometría al que éste debe estar sujeto. Posteriormente, la sección IV está enfocada en describir los diferentes constituyentes de materia que nuestro Universo puede contener. De ésta manera, en la sección V se obtienen las ecuaciones finales que describen la dinámica del Cosmos. Como es de esperarse, cualquier teoría física que esté sujeta a pruebas experimentales contiene cantidades observables, en la sección VI describimos los parámetros cosmológicos que nos ayudarán con la comprobación de nuestras teorías. En la sección VII se describe una de las mediciones clásicas que nos permiten hacer fuertes constricciones sobre los parámetros de densidad y curvatura en el Cosmos. Una vez que ya tenemos el conjunto de parámetros que describen la teoría y los resultados observacionales, es preciso tener un método de análisis de dichos resultados. Debido a la naturaleza de nuestras observaciones (no podemos generar múltiples Universos) en la sección VIII damos un pequeño repaso de la estadística Bayesiana. Éste artículo se centra solamente en la inferencia de parámetros. En la Cosmología estándar se suelen tener teorías con diversos parámetros, por lo que la realización analítica de nuestro estudio usualmente no es posible y para ello en la sección IX nos enfocamos en proporcionar las herramientas computacionales básicas que permiten hacer la inferencia de parámetros de forma numérica. Finalmente, estos conceptos son aplicados en un par de ejemplos muy simples: ajustar los parámetros libres de una línea recta (sección X) y ajustar las distancias luminosas vistas a través de Supernovas (sección XI).

## II. EL UNIVERSO OBSERVABLE

La descripción estándar de las propiedades dinámicas del Universo se basa en la teoría de la Relatividad General de Einstein, la cual construye una conexión entre la geometría del espacio-tiempo y su contenido de materia a través de cantidades fundamentales, como son el tensor de Einstein  $G_{\mu\nu}$  y el tensor de Energía-momento  $T_{\mu\nu}$

$$G_{\mu\nu} \equiv R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R = 8\pi GT_{\mu\nu}. \quad (1)$$

El lado izquierdo de la igualdad describe la geometría del espacio-tiempo englobada en las componentes del tensor de Ricci  $R_{\mu\nu}$ , el escalar de Ricci  $R$  y la métrica del espacio-tiempo  $g_{\mu\nu}$ . Éstas en conjunto dirigen el comportamiento de los constituyentes  $T_{\mu\nu}$  del Universo. Una modificación aceptable a las ecuaciones de Einstein es la introducción de una invariante bajo transformaciones de Lorentz  $\Lambda g_{\mu\nu}$

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R + \Lambda g_{\mu\nu} = 8\pi GT_{\mu\nu}, \quad (2)$$

donde  $\Lambda$  se le denomina constante cosmológica y su valor, de acuerdo con observaciones astrofísicas, es  $\Lambda \sim 10^{-52}m^{-2}$ ; veremos un poco más acerca de esta componente en la siguiente sección. El sistema de ecuaciones (2) es, en general, un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales acopladas cuasi-lineales y de segundo orden para los diez elementos del tensor métrico. Sin embargo, éstas pueden presentar soluciones analíticas simples en la presencia de simetrías genéricas, como veremos a continuación.

### III. GEOMETRÍA DEL ESPACIO-TIEMPO

Para poder especificar la geometría del Universo, una suposición esencial es el *Principio Cosmológico*: a un tiempo particular y en escalas suficientemente grandes el Universo observable puede considerarse como *Homogéneo e Isotrópico* con gran precisión. Por ejemplo, en escalas superiores a 100 Mega-parsecs<sup>13</sup> la distribución de galaxias observadas sobre la esfera celeste justifica la suposición de isotropía. Además de esto, la uniformidad observada en la distribución de temperaturas [una parte en 10<sup>5</sup>] medida a través de la radiación Cómica en el Fondo de Microondas (CMB) es la mejor evidencia observacional que tenemos a favor de una isotropía universal. Por tanto, si la isotropía se da por sentado y teniendo en cuenta que nuestra posición ocupada en el Universo no tiene preferencia sobre ninguna otra -conocido como el *Principio Copernicano*- por tanto la homogeneidad se sigue de considerar isotropía en cada punto.

**Homogeneidad** establece que el Universo se observa por igual en cada punto del espacio.

**Isotropía** establece que el Universo se observa por igual en todas las direcciones.

#### Métrica Friedmann-Robertson-Walker

Vamos a incorporar los postulados de Homogeneidad e Isotropía en la descripción geométrica del Universo. El primer postulado demanda que todos los puntos sobre una hiper-superficie espacial sean equivalentes, mientras que el segundo asegura que todas las direcciones sobre dicha hiper-superficie también son equivalentes para observadores fundamentales. Esto es, isotropía requiere que la distribución de galaxias a dos tiempos distintos sea equivalente, mientras que la homogeneidad requiere que el factor de magnificación deba ser independiente de la ubicación de la distribución. Además, a través de los años, observaciones cosmológicas han provisto evidencia contundente de que el Universo actual se encuentra en un período de expansión acelerada. De esta manera es preciso describir nuestro Universo con una métrica que contenga toda esta información. Ésta métrica que describe las escalas más grandes se le conoce como métrica de Friedmann-Robertson-Walker (FRW), y queda determinada por el siguiente intervalo

$$ds^2 = dt^2 - a^2(t) \left[ \frac{dr^2}{1 - Kr^2} + r^2 d\Omega^2 \right], \quad (3)$$

donde  $r$  es la coordenada radial y  $d\Omega^2 = d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2$  es la métrica de la 2-esfera. El término  $a(t)$  se le conoce como el factor de escala normalizado y representa la función de magnificación de nuestro Universo. Nótese que para obtener un Universo en expansión es necesario que  $\dot{a} \equiv \frac{da(t)}{dt} > 0$ . La constante  $K$  describe la geometría de las secciones espaciales y dependiendo del valor  $K > 0$ ,  $K = 0$  o  $K < 0$  representa Universos tipo cerrado  $\mathcal{S}^3$ , plano  $\mathcal{R}^3$  o abierto  $\mathcal{H}^3$  respectivamente. Considerando la métrica  $g_{\mu\nu}$  de la forma (3), los únicos términos de curvatura distintos de cero son

$$R_0^0 = -\frac{3\ddot{a}}{a}, \quad R_j^i = \left( \frac{\ddot{a}}{a} + \frac{2\dot{a}^2}{a^2} + \frac{2K}{a^2} \right) \delta_j^i, \quad R = 6 \left( \frac{\ddot{a}}{a} + \frac{\dot{a}^2}{a^2} + \frac{K}{a^2} \right), \quad (4)$$

o, a partir de (1) y (4), el tensor de Einstein está dado por

$$G_0^0 = 3 \left[ \left( \frac{\dot{a}}{a} \right)^2 + \frac{K}{a^2} \right], \quad G_j^i = \left[ 2\frac{\ddot{a}}{a} + \left( \frac{\dot{a}}{a} \right)^2 + \frac{K}{a^2} \right] \delta_j^i. \quad (5)$$

Por tanto, la dinámica del espacio-tiempo en un universo homogéneo e isotrópico se reduce a determinar el factor de escala normalizado  $a(t)$ , el cual se calcula una vez que el contenido de materia quede especificado.

### IV. INVENTARIO CÓSMICO

Una vez que se ha especificado la geometría del espacio-tiempo solo falta definir el contenido de materia para resolver las ecuaciones de Einstein. Consideraremos a los *fluidos perfectos* ideales como la fuente principal del tensor

de energía-momento

$$T^{\mu\nu} = (\rho + p)u^\mu u^\nu - pg^{\mu\nu}, \quad (6)$$

donde  $\rho$  es la densidad de energía y  $p$  es la presión isotrópica del fluido, ambas medidas por un observador en el sistema de referencia inercial local, donde el fluido se encuentra en reposo. En éste sistema, la 4-velocidad del fluido es  $u^\mu = (1, 0, 0, 0)$ . El tensor de energía-momento se reduce a  $T_\nu^\mu = \text{diag}(-\rho, g^{ii}p)$ . La componente 00 de las ecuaciones de Einstein nos proporciona la ecuación de Friedmann

$$\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = \frac{8\pi G}{3}\rho - \frac{K}{a^2} + \frac{\Lambda}{3}. \quad (7)$$

Por otro lado, habiendo definido  $T_\nu^\mu$  es posible obtener la conservación de la energía a partir de  $\nabla_\mu T_\nu^\mu = 0$ , la cual conlleva a la ecuación de continuidad

$$\dot{\rho} + 3\frac{\dot{a}}{a}(\rho + p) = 0. \quad (8)$$

Para poder entender las propiedades dinámicas del Universo, primero se necesita tener en cuenta el contenido total de éste. Nuestro enfoque se basa en los fluidos perfectos barotrópicos que satisfacen una *ecuación de estado* dependiente del tiempo  $w(a)$  de la forma  $p = w(a)\rho$ . Si además se considera  $w$  igual a una constante, la ecuación de continuidad (8) puede ser fácilmente integrada para obtener

$$\rho \propto a^{-3(1+w)}. \quad (9)$$

Además, en un Universo dominado por la densidad de energía  $\rho$  la ecuación de Friedmann (7) nos lleva a la evolución temporal del factor de escala

$$a \propto t^{2/3(1+w)}, \quad w \neq -1. \quad (10)$$

Esto es, la evolución del Universo cuya única componente es un fluido perfecto puede calcularse una vez especificada su ecuación de estado. El modelo de materia oscura fría con constante cosmológica ( $\Lambda$ CDM) se basa en cuatro ingredientes principales descritos por: la radiación (fotones y neutrinos sin masa), materia en forma de bariones, una contribuyente de materia oscura fría (DM) y la energía del vacío ( $\Lambda$ ). El comportamiento de cada uno de estos constituyentes se resume de la siguiente manera:

### Radiación

Esta componente relativista domina durante las etapas tempranas del Universo y se caracteriza por tener una presión asociada  $p_r = \rho_r/3$ , y por tanto una ecuación de estado  $w_r = 1/3$ . Además la evolución de la densidad de energía y el factor de escala están dados por

$$\rho_r(t) \propto a^{-4}, \quad \text{and} \quad a(t) \propto t^{1/2}. \quad (11)$$

La densidad de energía de la radiación total en el Universo puede describirse en términos de dos contribuyentes principales: fotones ( $\gamma$ ) y neutrinos sin masa ( $\nu$ ):

$$\rho_r = \rho_\gamma(t) + \rho_\nu(t). \quad (12)$$

*Fotones.* Los fotones primordiales juegan un papel muy importante en la cosmología observacional ya que ellos constituyen la radiación cósmica en el fondo de microondas que observamos hoy en día<sup>1</sup>

*Neutrinos sin masa.* Los neutrinos son clasificados como leptones débilmente interactuantes los cuales existen en tres sabores: neutrino del electrón  $\nu_e$ , muon  $\nu_\mu$  y tau  $\nu_\tau$ ; todos ellos tienen asociado una antipartícula  $\bar{\nu}_e$ ,  $\bar{\nu}_\mu$ ,  $\bar{\nu}_\tau$ . La densidad de energía de los neutrinos que permea el cosmos (estimada a partir de argumentos teóricos) esta dada por

$$\rho_\nu = N_{\text{eff}} \times \frac{7}{8} \times \left(\frac{4}{11}\right)^{4/3} \rho_\gamma, \quad (13)$$

donde  $N_{\text{eff}}$  es el número efectivo de especies de neutrinos; nótese que considerando el modelo estándar se tiene  $N_{\text{eff}} = 3.046$ . Recientemente varios experimentos sugieren que los neutrinos efectivamente poseen una masa aunque muy pequeña, por ejemplo a través experimentos que detectan neutrinos atmosféricos o neutrinos solares. Aunado a esto, observaciones cosmológicas también pueden imponer límites en las masas de los neutrinos; algunos artículos de revisión sobre el tema<sup>2 y 3</sup>.

## Materia

Cualquier tipo de material con presión despreciable es usualmente considerado como *polvo*. Esta propiedad se representa a través de una ecuación de estado  $w_m = 0$  y densidad de energía dada por

$$\rho_m(t) \propto a^{-3}, \quad a(t) \propto t^{2/3}. \quad (14)$$

El contenido total de materia del universo viene en diferentes formas, por ejemplo, además de la materia bariónica que comúnmente conocemos y observamos en el laboratorio, observaciones en la estructura del Universo a gran escala sugieren que la mayor cantidad del contenido galáctico es de la forma de algún tipo no-bariónico de materia, denominada como *materia oscura*. La densidad de materia total puede expresarse como la suma de las contribuciones bariónicas (b) y de materia oscura (DM)

$$\rho_m(t) = \rho_b(t) + \rho_{DM}(t). \quad (15)$$

*Bariones*. Son la base de la materia que fácilmente localizamos alrededor de nuestro entorno (protones  $p^+$  y neutrones  $n^0$ ). Además si consideramos que el Universo como un todo tiene una carga total neutra, por tanto debe de existir un número igual de protones que de electrones ( $e^-$  - leptones cargados). Un artículo de revisión sobre la formación de elementos en el big bang puede encontrarse en<sup>4</sup>.

*Materia oscura*. La existencia de materia oscura en forma no-bariónica puede ser inferida a partir de manifestaciones gravitacionales a través de, por ejemplo, el comportamiento plano detectado en las curvas de rotación de diversas galaxias espirales, la razón masa-luz observada en cúmulos de galaxias y la distorsión de la luz proveniente de fuentes lejanas medida por lentes gravitacionales. Una discusión extensa sobre el estado de la materia oscura, incluyendo evidencia experimental y motivaciones teóricas es presentado por<sup>6</sup>.

## Vacío

Sí el término de la constante cosmológica se mueve hacia el lado derecho de las ecuaciones de Einstein, éste puede ser asociado a la densidad de energía del vacío, dada por

$$\rho_\Lambda \equiv \frac{\Lambda}{8\pi G}. \quad (16)$$

Extrapolando nuestras teorías hacia el futuro, donde la materia y la radiación son diluidas debido a la expansión del Universo, la densidad de energía del vacío permanece siempre con el mismo valor constante  $\rho_\Lambda$ . Éste tipo de energía puede ser modelada como un fluido perfecto con presión negativa igual a  $p_\Lambda = -\rho_\Lambda$ , la cual tiene una ecuación de estado asociada  $w_\Lambda = -1$ . Por tanto la constante cosmológica puede verse como la forma más simple de una componente de *energía oscura*, comúnmente considerada como el principal candidato para la explicación de la aceleración actual del cosmos. En<sup>5</sup> encuentran que una ecuación de estado dependiente del tiempo  $w_{DE}(a)$  provee una mejor descripción de las observaciones actuales.

## Curvatura

Una componente importante de la densidad total del Universo es la contribución de la curvatura espacial, la cual puede ser considerada como cualquier otra componente si definimos una densidad de energía ficticia como

$$\rho_k \equiv -\frac{3K}{8\pi G}a^{-2}. \quad (17)$$

Por tanto la densidad de energía correspondiente al término de curvatura queda descrita por una ecuación de estado  $w_k = -1/3$ , para la cual el factor de escala evoluciona proporcional al tiempo cósmico  $a \propto t$ . El comportamiento general del término de curvatura se entiende fácilmente si la ecuación de Friedmann se reescribe (sin considerar la constante cosmológica) de la siguiente manera

$$\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = \frac{8\pi G}{3}(\rho + \rho_k). \quad (18)$$

Considerando que la densidad total del universo  $\rho$  es positiva, la expansión universal solo puede detenerse si la geometría de éste es cerrada  $K > 0$  ( $\rho_k < 0$ ) o de cualquier otra manera el universo se expandirá por siempre. Notamos de la ecuación (18) que para un valor de  $(\dot{a}/a)$  muy particular existe una densidad para la cual el Universo posee una curvaruta plana ( $K = 0$ ). A éste valor de la densidad se le conoce como la *densidad crítica*, y esta definida por

$$\rho_c(t) \equiv \frac{3H^2}{8\pi G}. \quad (19)$$

## V. ECUACIONES COSMOLÓGICAS

Una vez que se ha especificado el contenido de materia, toda la información sobre la dinámica del cosmos queda englobada en el factor de escala. Por ejemplo, consideremos una expansión en serie de Taylor del factor de escala alrededor del tiempo actual  $t_0$

$$a(t) = a[t_0 - (t_0 - t)] \quad (20)$$

$$= a(t_0) - (t_0 - t)\dot{a}(t_0) + \frac{1}{2}(t_0 - t)\ddot{a}(t_0) - \dots \quad (21)$$

$$= a(t_0)[1 - (t_0 - t)H(t_0) - \frac{1}{2}(t_0 - t)^2q(t_0)H^2(t_0) - \dots], \quad (22)$$

donde se ha definido la función de Hubble  $H(t)$  y la función de desaceleración  $q(t)$  como

$$H(t) \equiv \frac{\dot{a}(t)}{a(t)}, \quad q(t) \equiv -\frac{\ddot{a}(t)a(t)}{\dot{a}^2(t)}. \quad (23)$$

Los valores de estas funciones al día de hoy usualmente se denotan como  $H_0 \equiv H(t_0) = 100h$  y  $q_0 \equiv q(t_0)$ . También podemos incluir la razón de la densidad de energía relativa a la densidad crítica del universo como el *parámetro de densidad adimensional*

$$\Omega_i(t) \equiv \frac{\rho_i(t)}{\rho_c(t)}, \quad (24)$$

donde el índice  $i$  etiqueta un tipo particular de componente, como lo es la materia, radiación, etc..

Por lo tanto, la ecuación de Friedmann y la ecuación de aceleración para un Universo lleno de un conjunto de fluidos perfectos se pueden escribir de la siguiente manera

$$\left(\frac{H}{H_0}\right)^2 = \sum_i \Omega_{i,0} a^{-3(1+w_i)} + \Omega_{k,0} a^{-2}, \quad (25)$$

$$q = \frac{1}{2} \sum_i \Omega_i(t)(1 + 3w_i). \quad (26)$$

## VI. PARÁMETROS COSMOLÓGICOS

En la sección anterior hemos desarrollado las principales ecuaciones que describen la evolución del universo a gran escala. Notamos que la estructura total del CMB, espectro de potencias en la materia y distancias luminosas dependen fuertemente de las condiciones esenciales que surgen a partir de la época inflacionaria, de la densidad de materia y de la razón de expansión del universo  $H_0$ . En esta sección se da una breve introducción a las cantidades o parámetros utilizados en la descripción de las propiedades del cosmos.

### A. Parámetros base

Este tipo de parámetros, comúnmente denominados como *parámetros estándar*, son considerados como las principales cantidades utilizadas en la descripción del Universo. Éstos, sin embargo, no son predichos por una teoría fundamental sino que tienen que ser modulados a mano de tal manera que una combinación apropiada provea la

mejor descripción de las observaciones astrofísicas y cosmológicas actuales. Variaciones de estos parámetros afectan la amplitud y forma del espectro, así como las distancias luminosas medidas, y que por consecuencia desemboca en diferentes realizaciones de nuestro Universo. Existe una clasificación de estos parámetros dependiendo de las escalas donde se ven involucrados.

### Parámetros de Fondo

La descripción actual del universo homogéneo puede darse simplemente en términos de los parámetros de densidad  $\Omega_{0,i}$  y el parámetro de Hubble  $H_0$ , a través de la ecuación de Friedmann

$$H^2 = H_0^2 [(\Omega_{\gamma,0} + \Omega_{\nu,0})a^{-4} + (\Omega_{b,0} + \Omega_{DM,0})a^{-3} + \Omega_{k,0}a^{-2} + \Omega_{\Lambda,0}] \quad (27)$$

Los términos que contienen contribuciones de radiación son medidos con gran precisión. Por ejemplo, utilizando mediciones del satélite WMAP se encuentra que  $\Omega_{\gamma,0} = 2.469 \times 10^{-5} h^{-2}$  correspondiente a una temperatura  $T_{cmb} = 2.725 K$ . De manera muy similar para los neutrinos, mientras estos mantengan un comportamiento relativista se pueden relacionar con la densidad de los fotones a través de (13). Sin embargo, variaciones del resto de los parámetros deja distintos tipos de huellas en la historia y la evolución de las distancias luminosas vistas a través de Supernovas. Las líneas sólidas de la Figura 1 corresponden a los valores teóricos del módulo de la distancia  $\mu$  para tres combinaciones de  $\Omega_{m,0}$  y  $\Omega_{\Lambda,0}$ . Nótese que los objetos parecen estar más alejados (se observan más tenues) en un universo con constante cosmológica ( $\Omega_{\Lambda} \neq 0$ ) que en uno dominado sólo por materia ( $\Omega_{\Lambda} = 0$ ).

Por otro lado, la existencia de fuertes degeneraciones a partir de distintas combinaciones de parámetros también es notoria. En particular la *degeneración geométrica* que involucra  $\Omega_m$ ,  $\Omega_{\Lambda}$  y el parámetro de curvatura  $\Omega_k = 1 - \Omega_m - \Omega_{\Lambda}$ . Para reducir estas degeneraciones es común introducir una combinación de parámetros cosmológicos de tal manera que estos tengan efectos ortogonales en las mediciones, por ejemplo, una parametrización estándar se basa en las *densidades de energía físicas* de materia oscura  $\Omega_{DM} h^2$  y bariones  $\Omega_b h^2$ .

### Parámetros derivados

El conjunto estándar de parámetros, mencionado previamente, provee una descripción adecuada de los modelos cosmológicos. Sin embargo, esta parametrización no es única y alguna otra puede ser tan buena como ésta. Diversas parametrizaciones hacen uso del conocimiento de la física o de la sensibilidad de los detectores y por tanto pueden interpretarse de manera más natural. En general se pudo haber utilizado otro conjunto de parámetros para describir el universo, por ejemplo, algunos de ellos incluyen: la edad del universo, la temperatura actual del fondo de neutrinos, la época de igualdad materia-radiación, la época de reionización o alguna otra combinación. En el modelo  $\Lambda$ CDM con el fin de disminuir degeneraciones se utilizan como parámetros base las densidades de energía físicas  $\Omega_{DM,0} h^2$  y  $\Omega_{b,0} h^2$ , y además se consideran como cantidades derivadas los parámetros de densidad  $\Omega_{i,0}$  y la constante de Hubble  $H_0$ .

## VII. OBSERVACIONES

El rápido avance en el desarrollo de instrumentos observacionales altamente potentes ha guiado al surgimiento de la cosmología de alta precisión. En particular, experimentos desarrollados para medir las anisotropías observadas en el CMB, distancias luminosas a partir de explosiones de Supernovas tipo Ia y formación de estructura a gran escala. En este artículo nos enfocaremos en las distancias luminosas  $d_L$  medidas a partir de supernovas  $\mu = 5 \log(d_L) + 25$ , en función del corrimiento al rojo  $z = 1/a(t) - 1$ .

### A. Supernovas

Por más de casi dos décadas, observaciones en las supernovas han proporcionado evidencia decisiva de que la expansión actual del universo se encuentra en una etapa de aceleración. En particular estudios de supernovas tipo Ia consideradas como velas estándar: éstas tienen la propiedad de poseer la misma luminosidad intrínseca con alta precisión, hasta un factor de reescalamiento. Por tanto, la aceleración actual sugiere de la existencia de una componente exótica o la posibilidad de teorías alternativas, las cuales podrían producir tal efecto. Algunos ejemplos de detecciones de supernovas tipo Ia importantes a mencionar, incluyen:

- El Sloan Digital Sky Survey-II (SDSS) quien descubrió y midió curvas de luz de más de 327 supernovas tipo Ia espectroscópicamente confirmadas en el rango  $0.05 < z < 0.35$ .
- El programa The Equation of State: SuperNovae trace Cosmic Expansion (ESSENCE), encontró y analizó 60 supernovas en el intervalo de corrimiento al rojo  $0.15 < z < 0.70$ .
- La muestra del Supernova Legacy Survey (SNLS) tercer año de medición presenta 252 supernovas a altos corrimientos al rojo ( $0.15 < z < 1.1$ ).
- El Telescopio Espacial Hubble (HST) descubrió 21 supernovas tipo IA a corrimientos al rojo  $z \geq 1$ .
- Recientemente la compilación de todas las fuentes antes mencionadas es nombrada como Union 2.1

Las mediciones de supernovas pueden ser graficadas en el diagrama de Hubble con el módulo o luminosidad de la distancia en términos del corrimiento al rojo, para después localizar la mejor combinación de parámetros que describen las observaciones (ver Figura 1), como lo veremos en la siguiente sección.

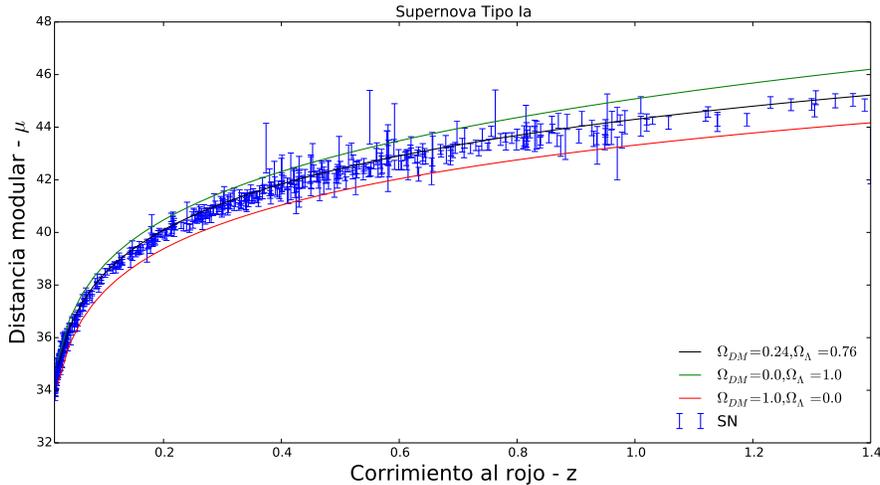


FIG. 1: Las líneas sólidas representan los valores teóricos del módulo de la distancia para tres modelos distintos, mientras que los datos son obtenidos a partir de mediciones de Supernovas tipo Ia.

## VIII. ESTADÍSTICA BAYESIANA

Durante la última década la información proveniente de un amplio rango de fuentes se ha incrementado sorprendentemente, por ejemplo de la radiación cósmica del fondo de microondas, de Supernovas y de la estructura a gran escala del universo. En este artículo nos enfocaremos en traducir la información experimental/observacional en constricciones de nuestros modelos resumido en la estimación de los parámetros cosmológicos involucrados. Uno de los objetivos principales de la cosmología observacional es determinar la combinación de parámetros que mejor describen los datos observacionales. En esta sección se introducen brevemente los conceptos matemáticos básicos necesarios para poder emplear el formalismo Bayesiano a la cosmología.

Comenzaremos definiendo el concepto más importante para cualquier procedimiento estadístico, esto es, el concepto de probabilidad. Si consideramos que  $x$  es una variable aleatoria relacionada con un evento en particular y  $P(x)$  su probabilidad correspondiente, entonces para ambos casos se debe cumplir que

$$P(x) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x) = 1, \quad (28a)$$

y además para eventos mutuamente excluyentes,

$$P(x_1 \cup x_2) = P(x_1) + P(x_2), \quad \text{si } x_1 \cap x_2 = \emptyset. \quad (28b)$$

En general

$$P(x_1, x_2) = P(x_1)P(x_1|x_2) \quad (28c)$$

La última regla nos dice que la probabilidad de que  $x_1$  y  $x_2$  sucedan estará determinada por el producto de la probabilidad de que  $x_1$  ocurra multiplicada por la probabilidad condicional de que  $x_2$  ocurra tal que  $x_1$  ha ocurrido también.

Ahora bien, cualquier procedimiento estadístico consiste de tres ingredientes básicos que deben ser entendidos: los datos, el modelo y un método de estimación.

- *Los datos.* Son una medida de nuestras observaciones, los cuales denotaremos como  $D$ .
- *El modelo.* En general, un *modelo*  $Q$  es una colección de mediciones de probabilidades  $P$ . Las distribuciones  $P_\theta$  son llamadas distribuciones del modelo, donde  $\theta$  son aquellos parámetros que contiene  $Q$ . En la estadística Bayesiana se considera que no existe diferencia matemática formal entre parámetros y datos, por lo que para ambos casos se debe asociar una distribución de probabilidad.
- Finalmente nos encontramos con el estimador de  $P_0$ . Un estimador para  $P_0$  es la representación de nuestra “mejor creencia” de  $P$  dados los datos  $D$ , i.e.  $P_0 = P_{mejor}$ .

### A. Teorema de Bayes, priors y posteriores.

El tratamiento Bayesiano de un problema estadístico se centra en el teorema de Bayes. Este teorema es una consecuencia directa de los axiomas de la probabilidad (28). Podemos observar de (28b), sin pérdida de generalidad, que siempre es posible reescribir  $P(x_2, x_1) = P(x_2)P(x_2|x_1)$ . Luego, como es de esperarse que la relación  $P(x_1, x_2) = P(x_2, x_1)$  se cumpla, obtenemos que

$$P(x_2|x_1) = \frac{P(x_2)P(x_1|x_2)}{P(x_1)}. \quad (29)$$

Este resultado es conocido como el *teorema de Bayes*. Por otro lado, ya que en la estadística Bayesiana no existe distinción formal entre datos y parámetros, podemos reescribir la ecuación anterior haciendo los cambios  $x_1 \rightarrow D$  y  $x_2 \rightarrow H$ , como

$$P(\theta, H|D) = \frac{P(\theta, H)P(D|\theta, H)}{P(D)} \quad (30)$$

En esta expresión agregamos el término  $\theta$  para especificar que  $H$  depende de dichos parámetros. Por otro lado, notemos que hemos agregado una nueva cantidad  $H$ , que llamaremos nuestra “hipótesis”. Esta última corresponde al modelo  $Q$  que según nuestra creencia se ajustaría mejor a los datos, i.e.  $H = Q_{mejor}$ .

La expresión anterior contiene con cuatro nuevos entes que deben ser entendidos a la perfección. En primera instancia  $P(\theta, H|D)$  es conocida como la distribución posterior de probabilidad (o simplemente posterior). Esta cantidad es básicamente el resultado principal a obtener ya que nos habla sobre la probabilidad de nuestro modelo (o parámetros del modelo). Usualmente, dicha cantidad se utiliza para acotar los parámetros del modelo. Luego tenemos los denominados “priors”,  $P(\theta, H)$ , los cuales son una distribución de probabilidad para nuestros parámetros, definidos a partir de nuestro propio conocimiento acerca del modelo. Generalmente, en el límite donde tenemos muchos datos, estos priors no son estadísticamente importantes, por lo que un prior típico para cada parámetro del modelo es un plano (una distribución uniforme). A continuación tenemos lo que es conocido como el Likelihood  $L(D; \theta) \equiv P(D|\theta, H)$  y es básicamente el elemento más importante al momento de hacer un estudio estadístico para la inferencia de los parámetros de nuestro modelo. Nos concentraremos en este elemento más adelante. Finalmente nos encontramos con la evidencia Bayesiana (o simplemente evidencia). Ésta actúa como un factor de normalización

$$P(D) = \int d\theta P(\theta, H)P(D|\theta, H). \quad (31)$$

La Evidencia es usualmente ignorada cuando el espacio de parámetros de un único modelo es probado, sin embargo resulta ser fundamental para hacer una comparación de modelos. Para propósitos de este artículo omitiremos esta cantidad.

Podemos ver que el teorema de Bayes tiene una implicación enorme respecto a una inferencia (de parámetros, por ejemplo) desde el punto de vista Bayesiano. En un escenario típico podemos tomar un conjunto de datos y esperar interpretarlos en términos de algún modelo. Sin embargo, lo que usualmente podemos hacer es lo opuesto, es decir, podemos tener un conjunto de datos y posteriormente confrontar un modelo tomando en cuenta la probabilidad que nuestro modelo se ajuste a los datos. De esta manera, como se puede ver de (30), el teorema de Bayes nos permite relacionar ambos escenarios, dándonos la posibilidad de conocer cual es el modelo (o parámetros del modelo) que mejor se ajusta a los datos.

## B. Likelihood

Tomando el teorema de Bayes (30), pero ignorando por un momento la evidencia Bayesiana y considerando un prior uniforme, el cálculo de la probabilidad a posteriori esta determinado únicamente por maximizar el Likelihood. Por supuesto, el ignorar la evidencia ocasiona que no sea posible el poder dar una probabilidad absoluta de los parámetros de nuestro modelo, sin embargo, lo que sí podemos hacer es dar una probabilidad relativa definida como el cociente entre probabilidades. De esta manera, el Likelihood en un punto particular en el espacio de parámetros puede ser comparado con el que mejor se ajuste a las observaciones,  $L_{max}$ . Podemos decir entonces que un modelo es aceptable si el cociente de los Likelihoods

$$\Lambda = -2 \ln \left[ \frac{L(D; \theta, H)}{L_{max}} \right] \quad (32)$$

es mayor que algún número dado.

Por otra parte, notemos que si nuestro posterior posee un único máximo global en  $\theta_0$ , siempre es posible hacer una expansión en serie de la forma

$$\ln L(D; H) = \ln L(D; H_0) + \frac{1}{2}(\theta_\alpha - \theta_{0\alpha}) \frac{\partial^2 \ln L}{\partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta} (\theta_\beta - \theta_{0\beta}) + \dots \quad (33)$$

donde  $H_0$  corresponde al modelo con los parámetros que mejor se ajustan a los datos y  $\theta_{0\alpha}$  son los componentes del vector de parámetros  $\theta_0$ . De esta manera podemos reescribir nuestro Likelihood como

$$L(D; H) = L(D; H_0) \exp \left[ -\frac{1}{2}(\theta_\alpha - \theta_{0\alpha}) H_{\alpha\beta} (\theta_\beta - \theta_{0\beta}) \right] \quad (34)$$

donde  $H_{\alpha\beta} = \partial^2 \ln L / \partial \theta_\alpha \partial \theta_\beta$  es llamada la matriz Hessiana y controla si la estimación de  $\theta_\alpha$  y  $\theta_\beta$  se encuentran correlacionadas. Si esta es diagonal, se dice que las estimaciones no están correlacionadas. Aquí es preciso remarcar que la aproximación es buena siempre que contemos con un único máximo global en nuestro posterior. Si por el contrario éste posee múltiples máximos locales, entonces la aproximación no serviría.

## C. Chi-cuadrada

Como se comentó anteriormente, la forma precisa para encontrar el posterior de algún modelo en particular estará dado por la maximización del Likelihood. Notemos que en la aproximación gaussiana, dicho tarea es equivalente a minimizar la expresión

$$\chi^2 \equiv (\theta_\alpha - \theta_{0\alpha}) H_{\alpha\beta} (\theta_\beta - \theta_{0\beta}). \quad (35)$$

La cantidad  $\chi^2$ , usualmente llamada *chi-cuadrada*, se relaciona con el Likelihood Gaussiano vía  $L = L_0^{-\chi^2/2}$ . Así pues, podemos decir que el proceso de maximizar un Likelihood Gaussiano es equivalente con el de minimizar una chi-cuadrada.

## D. Curvas de contorno y regiones de confianza

Una vez que se han obtenido los parámetros que mejor ajustan a los datos, nos interesa conocer las regiones de confianza donde los parámetros pueden ser considerados como buenos candidatos para nuestro modelo. Una elección

natural sería considerar regiones donde  $\chi^2$  es menor que algún cierto valor dado. Para el caso de distribuciones Gaussianas, como es el caso de (34), dichas regiones corresponden con elipsoides. La forma en la que éstas regiones de confianza pueden ser calculadas es un poco técnica para los fines de este capítulo, sin embargo, para los lectores interesados se les recomienda revisar la referencia<sup>7</sup>.

### E. Marginalización

Se puede dar el caso en el que al realizar un experimento sólo estemos interesados en analizar ciertos parámetros de nuestro modelo o existan parámetros extras considerados como ruido. Un ejemplo de estos parámetros de ruido podría ser aquellos correspondientes a efectos de calibración del experimento. Si este es el caso, lo que usualmente se hace es marginalizar sobre los parámetros que no son de interés, mediante la expresión

$$P(\theta_1, \dots, \theta_j, H|D) = \int d\theta_{j+1} \dots d\theta_m P(\theta, H|D), \quad (36)$$

donde  $m$  es el número total de parámetros en nuestro modelo y  $\theta_1, \dots, \theta_j$  corresponden a los parámetros que estamos interesados.

## IX. MÉTODOS NUMÉRICOS

En un escenario típico casi nunca es posible hacer el cálculo del posterior de manera analítica. Para estas circunstancias existe toda una caja de herramientas computacionales que pueden ayudarnos a realizar esta tarea de forma numérica. En esta sección nos enfocaremos en revisar las herramientas más simples (pero no por eso menos eficientes) que están a nuestra disposición.

### A. MCMC para la inferencia de parámetros

Una secuencia  $X_1, X_2, \dots$  de elementos aleatorios se dice que es una cadena de Markov si la distribución condicional de  $X_{n+1}$  dados  $X_1, \dots, X_n$  depende únicamente de  $X_n$ . Lo importante en este proceso es que se puede demostrar que éstas convergen a un estado estacionario donde varios elementos sucesivos de la cadena recaen. De esta manera, es posible estimar todas las cantidades de interés, por ejemplo promedios, varianza, etc..

El uso de este método en nuestro análisis Bayesiano es el de tratar de muestrear nuestro posterior con ayuda de estas cadenas. Para esto  $P(\theta, H|D)$  es aproximada por un conjunto de funciones delta

$$p(\theta, H|D) \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(\theta - \theta_i) \quad (37)$$

Así, el promedio de nuestro posterior puede ser calculado como

$$\langle \theta \rangle = \int d\theta \theta P(\theta, H|D) \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \theta_i \quad (38)$$

De esta manera, podemos promediar sobre funciones de nuestros parámetros mediante la expresión

$$\langle f(\theta) \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\theta_i). \quad (39)$$

#### 1. Algoritmo “Metropolis Hasting”

Como se explicó anteriormente, en un proceso MCMC es necesario proponer un nuevo paso en nuestra cadena tomando sólo como información el paso presente. Sin embargo, como es de esperarse, necesitamos un criterio de aceptación (o rechazo) de este nuevo paso, dependiendo de si éste resulta ser mejor para nuestro modelo o no. Por otro lado, si resulta que el nuevo paso es mejor, nos gustaría no siempre aceptarlo, ya que de hacerlo se podría dar

el caso de que no estemos mapeando completamente el espacio de parámetros e ir convergiendo a lo que podría ser un máximo local de probabilidad para nuestro posterior. El algoritmo más simple que contiene toda esta información en su metodología es conocido como el *algoritmo de Metropolis Hasting* (MHA). Éste básicamente consiste en lo siguiente:

Comenzando con un punto inicial aleatorio  $\theta_i$ , con probabilidad posterior asociada  $p_i = P(\theta_i, H|D)$ , se necesita proponer un candidato  $\theta_c$  tomándolo de alguna *distribución propuesta*  $q(\theta_i, \theta_c)$  que sea simétrica, i.e.  $q(\theta_i, \theta_c) = q(\theta_c, \theta_i)$ . De esta manera, la probabilidad de aceptar un nuevo punto estaría dada por

$$p(\text{aceptar}) = \min \left[ 1, \frac{p_c}{p_i} \right]. \quad (40)$$

Así, el algoritmo completo puede ser descrito por los siguientes pasos:

1. Elegir un valor inicial aleatorio  $\theta_i$  en el espacio de parámetros y calcular su correspondiente posterior.
2. Generar un nuevo candidato en el espacio de parámetros considerando alguna distribución propuesta y calcular su correspondiente posterior.
3. Aceptar (o no) el nuevo punto con ayuda del MHA.
4. Si el punto no es aceptado, repetir el punto anterior en la cadena.
5. Repetir los pasos del 2 al 4 hasta tener una cadena lo suficientemente larga.

## B. Pruebas de convergencia

Es clara la necesidad de algún criterio que nos permita saber cuando nuestras cadenas han convergido al estado estacionario, de lo contrario, uno podría tener una gran pérdida de tiempo computacionalmente hablando. La forma más simple de hacer dicha prueba consiste en correr multiples cadenas y detectar a simple vista que todas converjan a la misma región de parámetros. Sin embargo, existen métodos más formales que nos permiten hacer dicha verificación. La prueba clásica de convergencia utilizada en Cosmología es el llamado *criterio de convergencia de Gelman-Rubin* (1992)<sup>7,8</sup>. En éste se considera que una cadena ha convergido siempre que la cantidad

$$\hat{R} = \frac{\frac{N-1}{N}W + B(1 + \frac{1}{M})}{W}, \quad (41)$$

se aproxime a la unidad. Un criterio típico de convergencia es cuando  $R < 1.03$ . En esta expresión  $M$  es el número total de cadenas,  $N$  el número de puntos por cadena,  $B$  es la varianza relacionada entre cadenas y  $W$  es la varianza de cada cadena.

$$B = \frac{1}{M-1} \sum_{j=1}^M (\langle \theta^j \rangle - \langle \theta \rangle)^2, \quad W = \frac{1}{M(N-1)} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M (\theta_i^j - \langle \theta^j \rangle)^2 \quad (42)$$

## C. Algunos detalles importantes

*Sobre la distribución propuesta.*- La elección de una función propuesta para generar el nuevo paso en nuestra cadena es de vital importancia para la eficiencia al momento de hacer la inferencia en cuestión. Se puede dar el caso de que si el paso propuesto en la función es muy pequeño, entonces nuestro código muestreará muy lentamente el espacio de parámetros, lo que ocasionaría que nuestro método se hiciera muy ineficiente. Por otro lado, si el paso de nuestra función propuesta es muy grande ocasionaría que este pudiera mapear de forma muy ineficiente el espacio de parámetros, haciendo saltos grandes y dejando el valor de nuestros parámetros que mejor se ajustan a los datos entre las regiones intermedias entre pasos.

## X. AJUSTANDO UNA LÍNEA RECTA

En esta sección pondremos en uso las herramientas aprendidas anteriormente con uno de los ejemplos más simples que hay: ajustar una línea recta. Para esto, primero generaremos un conjunto de 25 datos a lo largo de la recta  $y = 1 + x$ . Digamos que estos datos fueron obtenidos a partir de una teoría en que la línea recta es el modelo que puede describir al sistema. Para dificultar un poco más las cosas, vamos a agregar a cada dato un ruido gaussiano con desviación estandar  $\sigma = 0.3$ , que puede ser debido a problemas en la medición. Con esto, nuestros datos lucirán como se pueden ver en la figura 2.

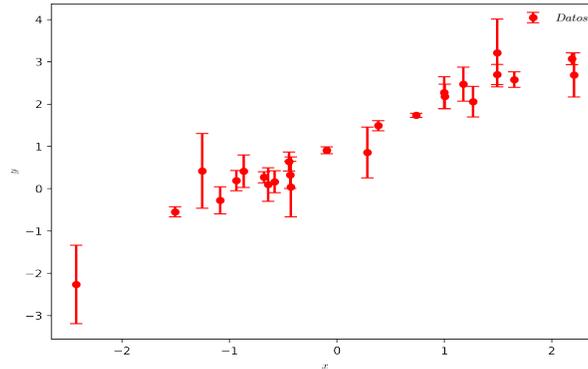


FIG. 2: Datos a lo largo de la recta  $y = 1 + x$  con un ruido gaussiano con desviación estandar  $\sigma = 0.3$ .

Ahora bien, supongamos que estamos interesados en conocer el valor de los parámetros  $a$  y  $b$  de nuestra recta  $y = a + bx$ , por lo que nos gustaría estimar dichos parámetros mediante un proceso de inferencia Bayesiana. Si consideramos que en principio no conocemos nada sobre el valor de nuestros parámetros libres, salvo las cotas límite en que éstos deberían estar, un buen prior para comenzar nuestra inferencia Bayesiana sería el considerar distribuciones planas. Para esto comenzaremos considerando los priors  $a \propto U[0, 1.5]$ , y  $b \propto U[0, 1.5]$ . Considerando que existen valores de  $a$ ,  $b$  y  $\sigma$  para los cuales los datos se fijan mejor (tal que el posterior es máximo global), entonces de (34) podemos escribir el Likelihood de nuestro sistema como

$$L(D; \text{recta}) \propto \exp \left[ -\frac{(y_d - y)^2}{2\sigma_d} \right]. \quad (43)$$

donde  $y_d$  son nuestros datos y  $\sigma_d$  los errores estimados de nuestras mediciones.

Con esto ya podemos generar nuestras MCMC utilizando el MHA. Para esto hicimos uso del módulo PyMC3<sup>9</sup> ya implementado en Python que nos permite emplear este método de forma más sencilla. Para el lector interesado, el código puede encontrarse en<sup>11</sup>. En nuestro análisis corrimos un total de 6 cadenas con 10,000 pasos cada una. Nuestro resultado obtenido puede verse en la Figura 3, de donde se obtiene que  $a = 0.990 \pm 0.034$  y  $b = 1.000 \pm 0.035$  con un criterio de convergencia Gelman-Rubin de  $R = 1.000$ . Como podemos ver en el lado izquierdo de la figura, existen regiones para las cuales la frecuencia de eventos en nuestro muestreo se ve incrementada. De esta manera, podemos decir que dichas regiones poseen un posterior más probable para ajustarse a nuestros datos. De hecho, se puede observar que los valores reales para  $a$  y  $b$  parecen encontrarse dentro de una desviación estándar del valor promedio estimado para estos parámetros. Adicionalmente se obtuvo el valor del criterio de convergencia de Gelman-Rubin para cada variable con la intención de verificar que nuestros resultados obtenidos han convergido. Como podemos ver este número es muy cercano a la unidad, por lo que nuestro criterio de convergencia se cumple.

Para ejemplificar los resultados obtenidos mediante este método, graficamos la recta teórica considerando los valores medios de nuestros parámetros que mejor ajustan a los datos. En la Figura 4 podemos observar esta gráfica. Como podemos observar, a pesar de que nuestra curva inferida por nuestro método Bayesiano no coincide exactamente con la recta real, ésta parece ajustar bastante bien nuestros datos. Por supuesto, esto se debe al hecho de que al contar con tan pocos datos, aún hay cierta ambigüedad en los parámetros que pueden ajustar relativamente bien a los datos.

Finalmente, sólo resta mostrar las típicas regiones de confianza para nuestros parámetros. Las regiones que son usuales mostrar son aquellas que corresponden a un múltiplo de desviaciones estandar de los parámetros de interés. En la figura 4 mostramos las típicas regiones de confianza de 1 a 4  $\sigma$ . Además hemos graficado en color rojo el valor real para nuestros parámetros. Lo que podemos observar rápidamente es que el valor real de nuestros parámetros se

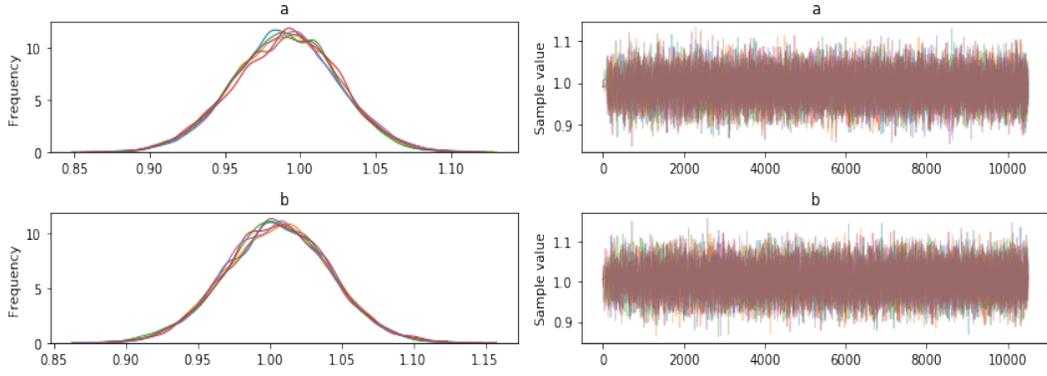


FIG. 3: Resultados obtenidos de nuestro muestreo de pasos en nuestras cadenas de Markov

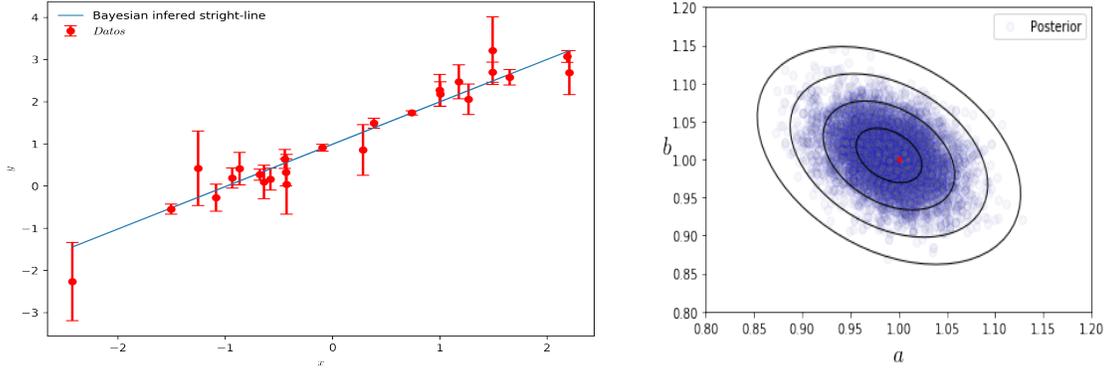


FIG. 4: Derecha: Curva inferida por nuestro método Bayesiano. Los parámetros obtenidos parecen ajustar muy bien nuestros datos. Izquierda: Regiones de confianza en 2D para nuestros parámetros  $a$  y  $b$ . Graficamos los contornos a 1-4  $\sigma$ .

encuentran a menos de una desviación estandar del valor estimado por nuestro método de inferencia. Por supuesto, la razón de esta discrepancia es debido a que sólo contamos con 25 datos para hacer nuestra inferencia Bayesiana; de contar con más, nuestros resultados deberían ser más precisos y podríamos ser capaces de acotar en una región muy pequeña los posibles valores que nuestros parámetros podrían tener.

## XI. COMPARANDO SUPERNOVAS

Ahora extrapolaremos el ejemplo de la línea a la cosmología observacional. Para realizar una comparación cuantitativa entre el módulo de la distancia medido por diversas supernovas con la distancia luminosa teórica hacemos uso del código `SimpleMC` desarrollado por A. Slosar y J.A. Vázquez<sup>12</sup>. Éste permite comprimir la información de la radiación cósmica de fondo en un número apropiado de parámetros y también incluye observaciones de las Oscilaciones Acústicas en los bariones (BAO). `SimpleMC` calcula de manera fácil y rápida velocidades de expansión y distancias del universo a partir de la ecuación de Friedmann, y a partir de ahí constricciones a los parámetros cosmológicos utilizando algoritmos MCMC (Markov Chain Monte Carlo).

A partir de los resultados mostrados en la Figura 5 se encuentra que la mejor combinación de parámetros cosmológicos que reproducen las observaciones actuales son los siguientes: a partir de Supernovas y agregando datos obtenidos por el satélite Planck tenemos que  $\Omega_{DM} = 0.30 \pm 0.04$ ,  $\Omega_b h^2 = 0.0224 \pm 0.0004$ ,  $h = H_0/100 = 0.68 \pm 0.04$ ,  $\Omega_k = -0.002 \pm 0.010$ . Por otro lado si utilizamos la combinación de BAO junto con Planck, como se hace en<sup>10</sup>, encontramos que  $\Omega_{DM} = 0.301 \pm 0.008$ ,  $\Omega_b h^2 = 0.0225 \pm 0.0003$ ,  $h = H_0/100 = 0.679 \pm 0.007$ ,  $\Omega_k = -0.003 \pm 0.003$ , donde el error en ambas combinaciones representa el 68% nivel de confianza ( $1\sigma$ ). Por lo tanto, el universo es esencialmente plano y además requiere de una constante cosmológica.

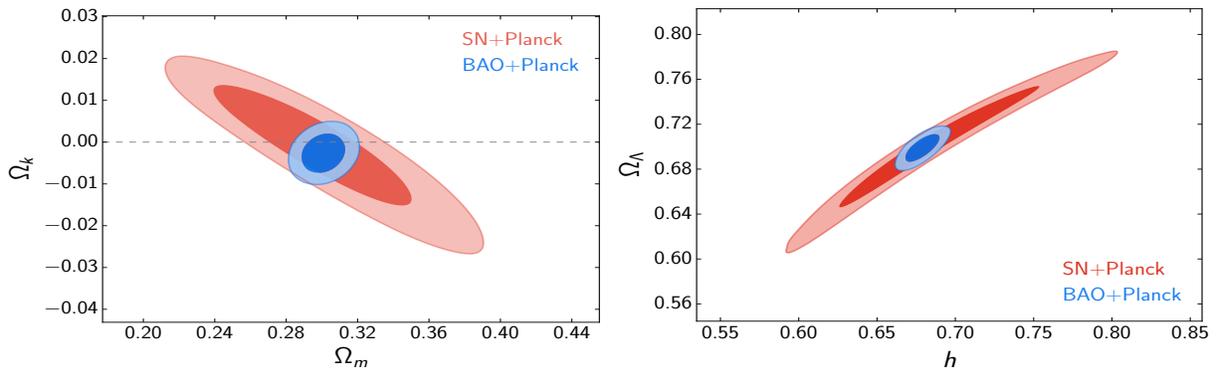


FIG. 5: Constricciones de los parámetros  $\Omega_m$ ,  $\Omega_k$ ,  $h = H_0/100$ ,  $\Omega_\Lambda$  empleados en la descripción del Universo; usando dos conjuntos de datos: Planck + SN (rojo) y Planck + BAO (azul). Los contornos muestran niveles de confianza 1- $\sigma$  (68%) y 2- $\sigma$  (95%).

\* javazquez@icf.unam.mx

<sup>1</sup> George F. Smoot, Summary of Results from COBE, astro-ph/9902027

<sup>2</sup> Yvonne Y. Y. Wong, Ann.Rev.Nucl.Part.Sci.(2011)61:69-98, DOI: 10.1146/annurev-nucl-102010-130252

<sup>3</sup> Julien Lesgourgues, Sergio Pastor, New Journal of Physics 16 (2014) 065002, DOI: 10.1088/1367-2630/16/6/065002

<sup>4</sup> David Tytler, *et. al.*, Physica Scripta, Volume 2000, T85, DOI: 10.1238/Physica.Topical.085a00012

<sup>5</sup> Gong-Bo Zhao, *et. al.*, Nature Astronomy 1 (9), 627

<sup>6</sup> A Vázquez-González, T Matos, Revista mexicana de Física E, 2008

<sup>7</sup> Verde L., astro-ph/0712.3028 (2007)

<sup>8</sup> Alan Heavens Alan Heavens; Statistical techniques in cosmology; May 2010

<sup>9</sup> Salvatier J., Wiecki T.V., Fonnesbeck C. (2016) Probabilistic programming in Python using PyMC3. PeerJ Computer Science DOI: 10.7717/peerj-cs.55.

<sup>10</sup> ric Aubourg, *et. al.* Cosmological implications of baryon acoustic oscillation (BAO) measurements, arXiv:1411.1074.

<sup>11</sup> <https://github.com/LuisPaAl/Statistical-academic>

<sup>12</sup> <https://github.com/slosar/april>

<sup>13</sup> 1 parsec (pc)  $\simeq$  3.261 años luz