#### MEMORIAS DE LA XXIX ESCUELA DE VERANO EN FÍSICA JUNIO 20 - JULIO 1, 2022 FORMATO VIRTUAL

José Récamier

Rocío Jáuregui

Instituto de Ciencias Físicas

Instituto de Física

Universidad Nacional Autónoma de México

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

Primera edición electrónica: Febrero de 2023

#### D.R.@2023 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

Contribuciones Introducción Agradecimientos Profesores participantes Alumnos participantes

#### • Contribuciones

José Rubén Alfaro Molina y Ernesto Belmont Moreno Detectores en la Astrofísica de altas energías	13
Santiago F. Caballero Benitez Materia cuántica y dinámica por mediciones	45
Arturo Camacho Guardián Condensados de Bose-Einstein de Excitones-Polaritones de Fren	54 kel
Jerónimo Alonso Cortez Quezada Gravedad, Geometría y Cuantización	67
Aurore Courtoy Hadrons: their structure from low to high energy	87
Rocío Jáuregui Renaud y Homar Rivera Moléculas exóticas de Rydberg	105
Antonio Marcelo Juárez Reyes Láseres de Cascadeo Cuántico (QCL) y Cavidades Ópticas tipo riott: Definiciones, configuraciones y aplicaciones	118 <i>Her</i> -
Eugenio Ley Koo Efecto Kapitza-Dirac	129
Merlyn Jaqueline Juárez-Gutiérrez y W. Luis Mochán Cálculo de propiedades ópticas de metamateriales	141

César Leonardo Ordoñez Romero	179
Ondas de espín en Cristales Magnónicos	
Alejandro Pérez Riascos	189
Patrones en la movilidad humana en zonas urbanas	
F. Castillo, E Vázquez-Vélez, B Campillo, O Flores, H Martínez	195
El fenómeno de descarga de corona	

#### • Introducción

La XXIX Escuela de Verano en Física fue organizada con apoyo del Posgrado en Ciencias Físicas, el Instituto de Física y el Instituto de Ciencias Físicas, de la Universidad Nacioonal Autónoma de México (UNAM). La Escuela, realizada en el periodo comprendido entre el 20 de junio y el 1 de julio de 2022, se llevó a cabo de forma virtual. Este esquema favoreció la participación de estudiantes de diversas entidades dentro de la República Mexicana y de entidades académicas hermanas localizadas en Ecuador, Estados Unidos de América, Perú, Guatemala y Colombia; asimismo impartieron conferencias y cursos reconocidos investigadores de muy diversas dependencias cercanas a la física dentro de la UNAM.

En esta edición de la Escuela se impartieron 7 cursos y 30 conferencias cubriéndose un amplio espectro con temas como: Cosmología moderna, interacción de luz no clásica con la materia, astrofísica observacional, óptica lineal y no lineal de meta-materiales, gases cuánticos, hadrones, trampas ultrasónicas, procesos fuera de equilibrio, inteligencia artificial, sistemas complejos, biofísica molecular, transporte difusivo en redes, computación cuántica, mecánica cuántica relativista, análisis de textos, entre otros.

Las grabaciones de los cursos y conferencias impartidos en esta Escuela están a su disposición en:

YouTube: Escuela de Verano en Física de la UNAM @EVF\_UNAM https://www.youtube.com/playlist?list=PLTRs-mkYBYNSan5DflvcDGhYYR6c6Wyx

> Rocío Jáuregui, IF UNAM José Récamier, ICF UNAM Enero, 2023

#### • Agradecimientos

Agradecemos los apoyos recibidos para la realización de esta Escuela a la Universidad Nacional Autónoma de México através de la Coordinación de la Investigación Científica, del Instituto de Física y del Instituto de Ciencias Físicas.

Agradecemos al equipo del Dr. Cesar Leonardo Ordoñez Romero por su colaboración en la organización de la infraestructura que nos permitió realizar esta escuela en formato virtual.

Agradecemos a la Lic. Celia B. Herrera Zambrano, al Ing. Francisco Raúl Bustos Maya, a la Ing. Juana Angelina Romero Vergara, al Ing. Arturo Esteban Quintero Cabañas, al Fis. Alberto García Ramírez, al M. en I. Daniel de Jesús Rosales Mendoza y al Dr. Eduardo Espinosa Ávila quienes se encargaron del funcionamiento del sistema de videoconferencias.

Agradecemos a la Lic. Celia B. Herrera Zambrano por su excelente trabajo en la elaboración de este libro.

#### • Profesores participantes (cursos)

- Vladimir Antón Ávila Reese (IA), Sebastien Fromenteau (ICF), José Alberto Vázquez (ICF), Cosmología moderna.
- Alfred U'Ren (ICN), Roberto de León Montiel (ICN), Interacción de luz no-clásica con materia: Una ruta hacia el desarrollo de nuevas tecnologías cuánticas.
- José Rubén Alfaro Molina (IF), Ernesto Belmont Moreno (IF), Astrofísica observacional de altas energías.
- W Luis Mochán (ICF), Óptica lineal y no lineal de metamateriales
- Jorge Amin Seman (IF), Freddy Jackson Poveda (IF), Gases cuánticos: una plataforma para el estudio de superfluidez y excitaciones cuánticas colectivas.
- Aurore Courtoy (IF), Hadrones: su estructura desde bajas hasta altas energías.
- Víctor Contreras (ICF), Karen Volke (IF), Trampas ultrasónicas: principios, desarrollo de instrumentación y aplicaciones.

#### • Profesores participantes (conferencias)

- Eric Vázquez Jáuregui (IF), Midiendo las propiedades de los neutrinos.
- Juan Rubén Gómez Solano (IF), Procesos fuera de equilibrio en sistemas de materia blanda
- Alejandro Vásquez Arzola (IF), La pinza óptica y el momento angular de la luz
- Horacio Martínez Valencia (ICF), Plasmas a presión atmosférica y su aplicación al tratamiento de aguas.
- David Ángel Ruiz Tijerina (IF), Twistrnica de exitones en materiales bidimensionales.
- David Philip Sanders (FC), Algoritmos para la optimización global
- Huiziel Enoc Sauceda Felix (IF), La revolución de la inteligencia artificial en la física y en la química: presente y futuro.
- Rubén Fossion (ICN), Sistemas complejos y modelos de robótica.

- Alejandro Pérez Riascos (IF), Procesos de transporte difusivo en redes y movilidad humana en ciudades.
- Guillermo Hinojosa (ICF), La carga eléctrica en la atmósfera terrestre: un vistazo con la lupa de la investigación fundamental.
- Jesús Maytorena Córdova (CCN), El efecto Hall cuántico y la fase de Berry.
- Arturo Camacho Guardián (IF), *Fluídos cuánticos de luz fuerte*mente interactuantes.
- Iván Ortega Blake (ICF), Biofísica molecular
- Andrés Rafael Botello Méndez (IF), Física a la nanoescala: teoría y simulación.
- Santiago Caballero Benitez (IF), Materia cuántica y dinámica por mediciones.
- Manan Vyas (ICF), Correlaciones en los datos del mercado financiero.
- Francisco Javier Sevilla Pérez (IF), La física estadística del movimiento de partículas activas: bacterias, coloides y más.
- Carlos Villarreal Luján (IF), Termodinámica de nanosistemas
- Antígona Segura (ICN), Habitabilidad y detección remota de vida en planetas alrededor de estrellas enanas M.
- Thomas Stegmann (ICF), Transporte electrónico en materiales bidimensionales.
- Rocío Jáuregui Renaud (IF), Moléculas exóticas de Rydberg.
- César Leonardo Ordoñez Romero (IF), Ondas de espín en cristales magnónicos.
- Antonio Juárez Reyes (ICF), Fundamentos de operación y aplicaciones de láseres de cascadeo cuántico, QCL.
- José Luis Ruvalcaba Sil (IF), Métodos espectroscópicos para el análisis material in situ del patrimonio cultural.
- Eugenioo Ley Koo (IF), Efecto Kapitza-Dirac.
- Jerónimo Alonso Cortez Quezada (FC), Gravitación, geometría y cuantización.

- Fernando Rojas (CNN), Computación cuántica, la era del qubit.
- Hernán Larralde Ridaura (ICF), Análisis de textos.
- Jesús Garduño (IF), Espectroscopia de resolución temporal de femtosegundos.
- Gerardo García Naumis (IF), *Mecánica cuántica relatiovista en la física de materiales bidimensionales.*
- Alberto Güijosa (ICN), Posgrado en Ciencias Físicas.

#### Simbología:

CCN	Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAN	M
FC	Facultad de Ciencias, UNAM	
IA	Institutop de Astronomía, UNAM	
ICN	Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM	
IF	Instituto de Física, UNAM	
ICF	Instituto de Ciencias Físicas, UNAM	

#### • Alumnos participantes

- 1. Aarón Rodrígiez Pacheco, FC UNAM, aaronrgp@ciencias.unam.mx
- 2. Adán Castillo Guerrero, FC UNAM, acastillo@ciencias.unam.mx
- 3. Adrián Bruce Nolasco Cabello, FC UNAM, bruce@ciencias.unam.mx
- 4. Aldair Hernández Cruz, FES Cuautitlán UNAM, aldairh396@gmail.com
- 5. Alejandra Dávila Rivera, UAZ, davilariveraalejandra@gmail.com
- 6. Alejandro Alvarado Corzo, FC UNAM, alex.corzo@ciencias.unam.mx
- Alexis Paul Vera Tapia, Escuela Sup. Pol. de Chimborazo, Ecuador, alexisvt1990@gmail.com
- 8. Ana Gabriela Fernández Morantes, Universidad de Cauca, Colombia, agfernandez216@unicauca.edu.co
- 9. Antonio Moreno Herrera, Universidad Autónoma de Chihuahua, a343369@uach.mx
- 10. Aurora Mata Sánchez, FC UNAM, auroms@ciencias.unam.mx
- 11. Bianca Michelle Cisneros Figueroa, FC Universidad Autónoma de Chihuahua, bianca090399@gmail.com
- 12. Brian Zamora Martínez, Instituto Tecnológico de Celaya, 16030548@itcelaya.edu.mx
- 13. Carlos Antonio Beauregard León, University of the Ozarks, clen203@ozarks.edu
- 14. Carmen Lizet Seminario Panta, Universidad Nacional de Piura, Perú, lizetseminario@gmail.com
- 15. César Enrique Terán Cisneros, UAEMor, cesarteran44@gmail.com
- 16. Clover Emmanuel de la Cruz, UAEMor, clover.roman@gmail.com
- 17. Diana Carolina Méndez Luna, Universidad Autónoma de Coahuila, dianamendez277@gmail.com
- 18. Diana Itzel Flores Baeza, FC UNAM, itzbae@ciencias.unam.mx
- 19. Diana Laura Quijada Ocampo, FC UNAM, diana-07@ciencias.unam.mx
- 20. Diego Emilio Domínguez Tableros, ESFM IPN, ddominguezt1800@alumno.ipn.mx
- 21. Eduardo Oropeza, Chapingo, e.oropeza.s@gmail.com

- 22. Elizabeth Rubio Juárez, FC UNAM, elizabethrubio@ciencias.unam.mx
- 23. Emmanuel Luna Avilés, FC UNAM, emmanuel.laf@ciencias.unam.mx
- 24. Erick Manuel Pineda Rios, FC UNAM, erickmanuelpinedarios@ciencias.unam.mx
- 25. Erick Sebastián Navarrete Cruz, FC UNAM, esnavarrete@ciencias.unam.mx
- 26. Erika Cecilia Carrillo Trejo, Universidad Autónoma de Zacatecas, erika.carrillo@fisica.uaz.edu.mx
- 27. Francisco Barreto Basave, UAEMor, barretofrancisco159@gmail.com
- 28. Francisco Guadalupe Jiménez López, Universidad Autónoma de Nuevo León, francisco\_lopez\_sc@icloud.com
- 29. Gabriel Rodríguez Guijarro, Universidad Autónoma de Zacatecas, gabriel.rodriguez@fisica.uaz.edu.mx
- 30. Gabriela Isabel Vera Garfias, UAM Azcapotzalco, al2162003725@azc.uam.mx
- 31. Gil Estéfano Rodríguez Rivera, Universidad de Guanajuato, ge.rodriguezrivera@ugto.mx
- 32. Guillermo Segura Gómez, Universidad de Guanajuato, seguragg2018@licifug.ugto.mx
- Guillermo Sierra Vargas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, A293878@alumnos.uaslp.mx
- Isabel Lucía Constantino Preciado, Universidad Autónoma de Nuevo León, luci\_2000@live.com
- 35. Jair Othoniel Domínguez Godínez, Universidad Autónoma de Nuevo León, othoniel.dominguezgdnz@uanl.edu.mx
- 36. Jesús Emmanuel Gómez Vargas, FC UAEMex, yami.jegv@gmail.com
- 37. Jorge Alejandro Avalos Haidacher, Universidad de San Carlos de Guatemala, jorgeavalos1523@gmail.com
- José Andrés Evangelio Vergaray, Escuela de Física-FCNM, UNAC, Perú, jaevangeliov@unac.edu.pe
- 39. José Carlos Joaquín Altamirano, FC UNAM, carlos-joakin7@ciencias.unam.mx
- 40. José Carlos Orozco Alvarez, Universidad de Guadalajara, jose.orozco5866@alumnos.udg.mx

- 41. José María Mondragón Alvarez, UAEMex, jmondragona001@alumno.uaemex.mx
- 42. Juan Augusto Cabrera Padilla, FC UNAM, august@ciencias.unam.mx
- 43. Litzy Lilian García Faustino, Universidad de las Américas, Puebla, litzy.garciafo@udlap.mx
- 44. Lucero Juárez Pinedo, Universidad Autónoma de Zacatecas, lucero.juarez@fisica.uaz.edu.mx
- 45. Manuel Fernando López Rodríguez, FC UNAM, fernando.lr@ciencias.unam.mx
- 46. María Belén Amaguaña Guevara, Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, Ecuador, mabijh2002@gmail.com
- 47. María Guadalupe Mendoza Granados, Universidad de Guanajuato, mendozagm2018@licifug.ugto.mx
- 48. Mario César Uyoa López, FC UNAM, cesaruyoa@ciencias.unam.mx
- 49. Mauricio Vladimir Tipa Valdivieso, Universidad Autónoma Metropolitana, c153bmauriciovtipav@gmail.com
- 50. Miguel Angel Agama Flores, Escuela Profesional de Física, Facultad de Ciencias, Perú, miguel.agama@unmsm.edu.pe
- 51. Nahúm Efrén Vázquez Espinosa, FC UNAM, nahum97@ciencias.unam.mx
- 52. Natalia Baez de la Luz, FC UNAM, nat27314@ciencias.unam.mx
- 53. Natalia Edith Mejía Bautista, FC UNAM, nmejia30@ciencias.unam.mx
- 54. Pedro Pablo Rosario Vargas, Universidad de Córdoba, Colombia, prosariovargas@correo.unicordoba.edu.co
- 55. Raúl Eduardo Santoy Flores, Universidad Autónoma de Nuevo León, santoyraul@gmail.com
- 56. Salem Hernández Ríos, Universidad Autónoma de Chihuahua, a339064@uach.mx
- 57. Sergio Eduardo Rodríguez Tinoco, FC UNAM, rodriguez94@ciencias.unam.mx
- 58. Ximena de la Rosa Gómez, FC UNAM, jdelarosa@ciencias.unam.mx
- 59. Zenaida Berenice Sánchez Méndez, FC UNAM, zeny.same@ciencias.unam.mx

# Detectores en la Astrofísica de Altas Energías

**Dr. Ernesto Belmont Moreno Dr. Ruben Alfaro** Instituto de Física, UNAM.

# Índice

Motivación

Interacción partículas-materia

Interacción radiación E.M.-materia

Detectores de partículas

Detectores de radiación EM

Laboratorios, experimentos y sus detectores

#### Presentación.

Este material se escribió como un dialogo informal del material presentado en la la "X Escuela de Física Experimental" en 2022.

#### Motivación

Primeramente, tenemos que preguntarnos y respondernos, ¿porque hablar de detectores de radiación? y en particular de radiación ionizante.

Son los instrumentos con los que podemos "ver" cosas que nuestros sentidos no perciben pero que existes, que están ahí, son una extensión de nuestros sentidos.

Esto podría se tanto ver la radiación emitida por algún ente del que hablamos, así como la que refleja esta cosa una vez emitida por nosotros u otras fuentes.

Cuando queremos ver cosas chicas nuestros ojos tienen un limite y nos auxiliamos por un instrumento óptico, el microscopio óptico, sin embargo, este tiene un limite de cuanto podemos aumentar ópticamente el tamaño de algo para verlo y es 1000X.

Ahora, tenemos que tener en cuenta que, si iluminamos algo chico para poder "verlo", esto es, interaccionar y reflejar la iluminación, tenemos que iluminar con algo que sea de tamaño comparable con lo que queremos ver, o aun mejor, mas chica. Con lo anterior tenemos una opción para iluminar cosas mas chicas es con partículas que para una velocidad dada se podrían considerar radiación con la que iluminamos. En particular se usan electrones y otras partículas cargadas acelerados que podemos ver como ondas y podemos calcular su longitud de onda con la fórmula de deBroglie. En este caso estamos hablando del microscopio electrónico o aceleradores de partículas.

Otra pregunta que habría que hacer y responder es ¿porque no podemos ver los átomos? Pues como dijimos, tenemos que iluminar con una radiación con longitud de onda de tamaño equiparable. Los ojos ven una estrecha ventana entre el violeta ( $\lambda = 4x10^{-7} m$ ) y el rojo ( $\lambda = 7x10^{-7} m$ ). El tamaño aproximado del átomo es de  $10^{-10} m$  por lo que claramente no es opción. En la figura 1 se presenta escalas de cosas pequeñas hasta el tamaño de un átomo en escala logarítmica. Nótese los submúltiplos del metro que nos vemos forzados a usar.

Quizás los ordenes de magnitud no digan mucho a nuestro sentido común, para poner más en contexto esto valores, si suponemos que el núcleo atómico es del tamaño de la cabeza de un alfiler (aproximadamente milímetros), el tamaño del átomo sería del orden de un estadio de futbol (aproximadamente cientos de metros), por lo tanto si es difícil observar con un microscopio un átomo , observar un núcleo o sus constituyentes es prácticamente imposible.



Electron microscope

Figura 1. Comparación del tamaño de cuerpos desde 1 mm hasta el de un átomo en escala logarítmica. Se muestra también instrumentos para observarlos.

Se usan las siguientes unidades:

1 mm =  $10^{-3}$  m, milímetro, 1 µm =  $10^{-6}$  m, micrómetro, 1 nm =  $10^{-9}$  m, nanómetro.

En la figura 2 vemos lo que sigue en tamaño mas pequeño hasta llegar a las partículas mas pequeñas de lo que se piensa hasta el momento que son los constituyentes más fundamentales de la materia. En el caso de los electrones y los quarks la cifra corresponde al limite máximo de tamaño.

Ahí los submúltiplos son mas pequeños.

Para poder estudiar la materia a esas escalas tan pequeñas, se utilizan métodos indirectos, como sería la colisión inelásticas de partículas, de tal forma que la detección de los productos de dichas colisiones nos pudieran dar información sobre la naturaleza y estructura (en caso de tenerla) de las partículas subatómicas.



1 nm =  $10^{-9}$  m, nanómetro, 1 pm =  $10^{-12}$  m, picómetro, 1 fm =  $10^{-15}$  m, femtómetro o fermi, 1 am =  $10^{-18}$  m, attómetro.

Figura 2. Comparación de tamaños desde un átomo hasta el limite mas pequeño conocido, nótese es escala logarítmica y al final solo es una cota. También se incluyen las unidades en metros.

Ahora pasamos a lo grande o lejano. Estamos hablando de detectar cosas como las estrellas que vemos, que son las estrellas cercanas de nuestra propia galaxia, la *Via Lactea*, pero no podemos ver la galaxia entera mas que con ayuda de amplificadores óptico como serian los telescopios ópticos. Aun mas difícil es ver todas las demás galaxias de nuestro entorno y menos las de todo el universo. Ver figura 3.



Figura 3. las estrellas de nuestra galaxia vistas desde la tierra y la recreación de lo mas exterior de nuestro universo, cada manchita es un cúmulo de galaxias.

¿De que radiación estamos hablando? Se tratar tanto de partículas así como de radiación electromagnética que de ahora en adelante abreviaremos EM.

Hablaremos de partículas cargadas como protones, partículas alfa, electrones y positrones, y partículas mas raras como muones, piones, kaones y otras. También hablamos de partículas neutras, sin carga eléctrica, como los neutrones, neutrinos y piones y kaones neutros. Y por ultimo los fotones o paquetes de radiación EM.

- Partículas
  - cargadas
    - p<sup>+</sup> α
    - e<sup>-</sup>, e<sup>+</sup>
    - μπκ...
    - neutras
      - n<sup>o</sup> ν π<sup>o</sup> κ<sup>o</sup>
  - Radiación EM
    - fotones

Ahora bien, existe radiación "natural" que nos llega del cielo y otra que tenemos en la superficie terrestre originadas por nuestro propio planeta.

Sus nombres se deben a cuestiones históricas, tenemos:

Radiación alfa,  $\alpha$ , que son dos neutrones y dos protones juntos emitidas por muchos materiales radiactivos o gases como el radón.

Radiación beta,  $\beta$ , electrones provenientes elementos como el tritio, <sup>3</sup>H o

de residuos de las pruebas de bombas atómicas de los años 50's

rayos gamma,  $\gamma$  , originados por minerales o reactores nucleares o de origen cósmico, de la atmosfera.

neutrones, <sup>o</sup>n, originados en la atmosfera, en los alrededores de la tierra o en los reactores nucleares.

neutrinos, v, tal vez las partículas mas abundantes del universo, originadas en el sol, desde adentro de la tierra, en la atmósfera o del cosmos.

Ya adentrándonos en el mundo de la física tenemos que mencionar que siguiendo el *Modelo Estándar* (SM) de la física de partículas, diremos que no todas las partículas interaccionan de igual manera, y entonces nombraremos en una primera aproximación la existencia de las 4 interacciones de la naturaleza:

Interacción Electromagnética, actúa en todas las partículas Cargadas Interacción Fuerte, actúa o afecta a los hadrones; protones, neutrones, Interacción Débil, actúa y explica el comportamiento de los Neutrinos Interacción Gravitacional, afecta a todo lo que tiene masa. Aquí entra una pregunta abierta, ¿como afecta a la materia oscura (DM)? y además, ¿las otras interacciones actúan en la DM?

Respecto al SM, ver figura 4, su explicación correspondería a todo otro curso. Viendo la tabla de partículas solo mencionaremos algunos aspectos.



## Modelo estándar de física de partículas

Figura 4. Esquema que muestra las partículas según el SM.

- Esta dividida en quarks (morados) y leptones(verdes), los quarks, aislados, no los vemos.

- Los leptones están por generaciones y en la primera generación vemos al electrón.

- En la segunda y tercera generación vemos a los  $\mu$  y las  $\tau$ , que ya hemos mencionado.

- Cada una de los anteriores tiene asociada un neutrino.

- A cada partícula le corresponde una antipartícula, pudiendo ser ella misma su antipartícula

- Por último, de color rojo, vemos los portadores de fuerza de los cuales solo mencionaremos el fotón.



Figura 5. Espectro de radiación EM mostrando las zonas transparentes y opacas de la atmósfera a estas longitudes de onda.

Respecto a los fotones, radiación EM, en la figura 5 vemos la transparencia de la atmosfera según la frecuencia a los fotones que nos llegan de afuera de la tierra. Observen que solo es transparente al visible y un poco de ultravioleta (UV) y un poco de infrarrojo (IR) además de otra ventana a ciertas frecuencias de radio. Al resto de frecuencias es opaca.

Por ultimo, en física de altas energías y astrofísica, las unidades de energía no son lo Joules (julios) sino se usan los electronvolts (eV) que se define como, 1 eV es la energía cinética adquirida por un electrón cuando se acelera en una diferencia de potencial de 1 volt. Ver la tabla 2 con sus múltiplos y otras unidades usadas para la masa y el momento. Esto ultimo de expresar masa y momento en función de eV y **c**, aunque pareciera muy extraño, es muy útil pues te da idea clara de que se está ablando.

Tabla 2 Multiplos de energia en eV. Petaelectronvolt PeV 10<sup>15</sup> eV Teraelectronvolt TeV 10<sup>12</sup> eV Gigaelectronvolt GeV 10<sup>9</sup> eV Megaelectronvolt MeV 10<sup>6</sup> eV kiloelectronvolt keV 10<sup>3</sup> eV



Figura 6. A la izquierda Victor Hess y su asenso para ver el origen de la radiacion. A la derecha uno de los satelites Vela para vigilar el cumplimiento de la veda de pruebas nucleares que descubrio la radiacio de origen cósmico.

Entrando a astrofísica, mencionaremos dos eventos que llamaron la atención respecto de que la radiación en nuestros alrededores, no provenía puramente de las piedras y tierra de la superficie terrestre. En 1911 Víctor Hess, en Austria, figura 6, tratando de entender la radiación ionizante hizo mediciones en un globo aerostático a diferentes alturas encontrando que conforme subía, la radiación aumentaba. Esto le indicó que había una fuente de radiación en el cielo, no solo en la tierra. En 1959 el satélite Vela, en orbita terrestre, hecho para vigilar se cumpla los cuerdos de no hacer pruebas de bombas atómicas en la superficie terrestre, descubrió que había radiación que también venia de otras fuentes, en particular de fuera de la tierra. Estos eventos nos indican que el vacío del espacio exterior en realidad no es tan vacío, es muy ruidoso.

Del espacio exterior nos llega radiación ionizante. De esta, es de interés para nosotros los rayos cósmicos y los rayos gamma. Los primeros son partículas, que si están cargadas su origen se pierde. Esto porque por su carga, están sometidos a cambios de trayectoria por los campos magnéticos de la tierra, de la luna del sol, del sistema solar, de nuestra galaxia y de otras galaxias y de todo lo existente en el universo. Los segundos, son fotones de radiación EM que pueden provenir de cualquier parte del universo pero que por carecer de carga nos indican la posición del origen.

nderstood (Burbidge et al. 1957).



Figura 7. Composición de partículas, en este caso núcleos que componen los rayos cósmicos que llegan a la superficie de la tierra, nótese que es escala logarítmica.

De los rayos cósmicos, partículas, su composición y abundancia en cuanto a núcleos cargados se puede ver en la figura 7, en forma económica diremos que mas del 90% son protones y después el resto.

La identificación (Z) de estos núcleos o rayos cósmicos, no es sencilla y se ha logrado de manera muy precisa por calorímetros (conjunto de detectores) que han sido enviados en satélites como es el caso del Alpha Magnetic Spectrometer que se encuentra la estación espacial internacional, o vuelos en globo como en el caso del detector CREAM (Cosmic Ray Energetics And Mass). Dada las limitaciones de peso de los detectores para estos casos, el rango de energías esta restringido. En el caso de los detectores ubicados en la superficie terrestre, la limitación de peso no es un problema, pero la precisión en la determinación de la Z es mucho menor, y en un mismo observatorio se pueden utilizar dos técnicas diferentes para realizar la detección de los eventos (como es el caso del observatorio Pierre Auger).

La medida de la energía y carga de los rayos cósmicos, no han ayudado a establecer modelos que explican el origen y la forma que tiene dicha distribución de energía.



Figura 8. Espectro de abundancia en función de la energía de los rayos cósmicos que llegan a la superficie de la tierra donde se indican también los procesos que suponemos dieron lugar a las partículas de esas energías y las fuentes de los datos que los reportaron. En la parte inferior se indica la máxima energía que se puede alcanzar en diversos experimentos. Escala log-log.

En la figura 8 vemos el espectro energético de estas partículas. Nótese que es una escala log-log pues el intervalo de abundancias y el intervalo de energías es muy amplo. De esta figura resaltamos lo siguiente. Entre mas energética es la partícula, es menos abundante. No es una recta, es decir esta dependencia de la abundancia con la energía no es lineal. Ajustando cálculos teóricos se ha marcado su mas probable origen, de nuestra galaxia o de otras galaxias. También se marca que experimento o detector reportó las mediciones mostradas. Por ultimo, en la abscisa, se marcan las máximas energías obtenidas en la tierra, hasta la fecha, por los diferentes experimentos o laboratorios.

Si es un reto determinar la Z de estas partículas, el distinguir si se trata de un núcleo o de un fotón ha sido un reto igualmente importante, principalmente en detectores terrestres.

22

Al igual que con los núcleos, las energías y abundancias nos han ayudado a establecer modelos astrofísicos de su origen, como es el Efecto Compton Inverso (IC).



Figura 9. Espectro de abundancia contra energía de los rayos gamma en el cosmos. Se muestran los mecanismos propuestos que originan las diferentes zonas energéticas.

En cuanto a los rayos gamma, en a figura 9 vemos un espectro donde vemos su abundancia en función de la energía donde también se indican algunos mecanismos que originan esa parte de del espectro, nótese las discontinuidades en lo valores debido a que se han unido y normalizado mediaciones de varios observatorios con diferentes principios incluso. En la figura 10 vemos 12 imágenes de todo el universo en algunos intervalos de energía con falsos colores donde podemos ver lo diferente que se vería si pudieron ver el cielo en esa ventana de radiación.

Ahora bien, estos detectores de los que hablamos hay que mencionar que tienen muchísimas ramas de aplicación incluyendo física de radiaciones en la industria, física nuclea y de iones pesados en la investigación y en la medicina, altas anergia y partículas elementales en investigación y en la astrofísica



Figura 10. Imágenes en falso color de diferentes ventanas espectrales del universo visto desde la superficie de la tierra. De izq. a derecha y de arriba a abajo son rayos gamma, raros X, ultravioleta lejano, ultravioleta cercano, óptico (Colores reales), infrarrojo cercano, infrarrojo, infrarrojo lejano, fondo de microondas(2 imágenes), radio y longitud de 21 Hz.

Empecemos con las partículas, ¿Como interactúan estas con la materia? Cuando pasan a través de la materia, las partículas interaccionan con los electrones y/o con los núcleos del medio, esta interacción puede ser débil, electromagnética o fuerte dependiendo de la partícula, sus efectos se pueden usar para detectar partículas. Cuando son interacciones electromagnéticas pueden tomar la forma de excitación, ionización, emisión de radiación Cherenkov, emisión de radiación de transición, fenómeno de Bremsstrahlung. Cuando es interacción fuerte habría producción de hadrones secundarios que generaría cascadas de hadrones. Cuando hay excitación de átomos y moléculas ocurre una subsecuente desexcitación mediante emisión de fotones.

Ocurre indización cuando los electrones de los átomos son liberados y al colectarlos detectamos la carga.

**Radiación Cherenkov** si la velocidad de la partícula es mayor que **c**, la velocidad de la luz en el medio, esta partícula emitirá luz y la cantidad y el ángulo dependen de la velocidad de la partícula además del medio.

**Radiación de Transición** cuando una partícula cargada cruza la frontera entre dos medios con diferente velocidad de la luz en esos medios se emite radiación, la cantidad de radiación aumenta con la relacion energía/masa

**Bremsstrahlung**, radiación de frenado, radiación que se emite cuando la velocidad de una partícula cambia.

#### Cascada electromagnética

Electrones de alta energía y fotones producen cascadas electromagnéticas por sucesivas producciones de pares y bremsstrahlung

#### Producción de hadrones

Partículas con interacción fuerte pueden producir nuevas articulas por interacción fuerte y si hay suficiente energía se producen "cascadas hadrónicas"

Cuando es radiación EM, ¿Como interaccionan con la materia? Limitándonos a Rayos x, rayos gamma y Rayos cósmicos tenemos que los fotones son partículas neutras y su interacción electromagnética se da mediante perdida de energía que genera un cambio en intensidad *I*.

$$dI = I(x+dx)-I(x) = -mI(x)dx$$

Llegando a la formula clásica  $I(x) = I_o e^{-mx}$ 

Existen tres procesos principales para estas interacciones:

**Efecto fotoeléctrico**: Ver figura 11. En este proceso el total de la energía del fotón es transferida a un electrón de un átomo. La energía cinética del fotón se divide en energía cinética del electrón  $E_{KINe}$  y su energía de ligadura o de ionización  $I_i$ 



Figura 11. Efecto fotoeléctrico.

**Dispersión de Compton**: Ver figura 12. En este caso se dispersa de un electrón ganándose un electrón libre. En ese proceso hay constricciones cinemáticas bien definidas que nos generan el bordo compton para la energía que se transfiere al electrón. Arriba de unos cuantos MeV se transfiere el 90% de la energía.

Los fotones son dispersados a cualquier ángulo, e<sup>-</sup> solo para adelante.



Figura 12. Dispersión de Compton.

Para hv >  $m_oc^2$  la sección  $\sigma$  va como Z/(hv). Este proceso domina en el intervalo 0.1 – 10 MeV.

Si el electrón tiene una energía inicial ultra-relativista y choca con el fotón, entonces ahora el fotón ganará energía, esto es lo que se ha postulado como el efecto Compton Inverso.

**Producción de pares:** Ver figura 13. Es posible si se cumple que  $h\nu > 2 \times m_{eo}c^2 = 1.022$ MeV en presencia de materia. Este proceso inicia en  $E\gamma > 10$  Mev, para  $E\gamma > 100$  MeV no aumenta mas

Después de su creación, el positrón pierde su energía por bremsstrahlung igual que un electrón. Después de perder su  $E_{KIN}$ , los positrones son capturados por un electrón creando un positronio t=10<sup>-10</sup>s y aniquilándose después.

 $e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma$ 

Cada fotón tendrá 511 MeV (masa en reposo del electrón)



Figura 13. Creación de pares.

Cada proceso da su contribución en forma independiente  $m=m_{fe}+m_{comp}+m_{par}$ Para muy alta energías se tiene  $\gamma \rightarrow e^+ + e^-$  bremsstrahlung g .... Chubasco electromagnético

La importancia y probabilidad de ocurrencia de cada una de estos procesos depende las partículas involucradas así como del medio en donde ocurren. En la figura 14 se muestra la atenuación debida a cada uno de estos procesos en función de la energía incidente de la radiación.

Estos mismo procesos ocurren en el universo, claro la densidad de materia es muy baja, pero no cero; en particular la interacción con la Luz de Fondo Extragalactica (EBL por sus siglas en inglés) pone límites a la distancia que puede viajar un fotón de alta energía antes de ser atenuado. Por lo tanto entre mas energética es la emisión de una fuente, mas cerca debe de estar a la tierra para que pueda ser observada. Para observar fuentes fuera de nuestra galaxia con emisión mayor a decenas de TeV debemos de contar con detectores de una alta eficiencia y observatorios que tenga una alta sensibilidad para diferencias un fotón de un núcleo. Se estima que por cada diez mil núcleos no llega un fotón por lo tanto los núcleos son un ruido de fondo muy alta para medir de forma eficiente a los fotones.



Figura 14.

Gráfica típica donde se muestra como, en función de la energía, los diferentes procesos tienen diferente importancia cuando ocurren en agua.

#### Detectores de Radiación

Es el instrumento que usa efectos específicos de la interacción de partículas con la materia para detectar, identificar y/o medir las propiedades de la partícula o radiación; son transductores para trasladar efectos directos de la radiación en señales (i.e. eléctricas) observables y registrables. Por ejemplo, los ojos son detectores de fotones, esto es, ver es hacer un experimento de dispersión de fotones. En este caso la fuente luminosa genera los fotones, los fotones chocan con el objeto, algunos se absorben, otros se reflejan y otros se dispersa, los fotones de regreso son detectados por la retina, traducidos a una seña eléctrica, pulso nervioso, se amplifican y transmiten al cerebro para procesarlo

#### Cámaras de Niebla

Es un contenedor lleno de un gas (aire) con algún vapor de alguna otra substancia sobresaturado, al paso de una partícula se produce ionización, los iones son la semilla para la condensación a lo largo de la trayectoria de la partícula viéndose como una cadena de gotitas.

#### Cámaras de Burbujas

Recipiente lleno de H<sub>2</sub> líquido a temperatura arriba del punto de ebullición, pero a presión por un pistón para que no hierva. Al pasar partículas, el pistón reduce la presión permitiendo se produzcan burbujas en la trayectoria. En 3 ms se fotografían con flash estereoscópicamente. Se regresa el pistón recomprimiendo el H<sub>2</sub>. Fue inventado por Glaser en 1952 bebiendo cerveza.

#### Detectores con gas Detectores con gas

#### **Contador-Geige Müller**

Un tubo metálico con un electrodo al centro, lleno gas, aplicando alto voltaje (AV) entre la pared (-, cátodo) y el elemento central (+, ánodo). Esto genera un fuerte campo electico cerca del alambre. Al pasa una partícula cargada en el gas lo ioniza y esto libera electrones, e<sup>-</sup>, que son acelerados en el campo eléctrico y a la vez liberan otros e<sup>-</sup> por ionización que a su vez son acelerados y ionizan generando una avalancha de electrones, esta avalancha se vuelve tan grande genera plasma y eventualmente una descarga. El gas usualmente es un gas noble (Ar) con algunas adiciones CO<sub>2</sub>, metano, isobutano,



Figura 15.

#### Cámara de Chispas

Volumen de gas con placas metálicas (electrodos); relleno con un gas noble, Ar, Ne Partículas cargadas en el gas -> ionizan-> liberan electrones -> estela de pares ion-electrones en el camino.

El paso de la partícula por un detector de disparo enciende el alto voltaaje, AV, entre las placas genera un fuerte campo eléctrico. Se genera como en el caso anterior una avalancha de electrones y por tanto un plasma en la trayectoria. El gas conductor es ionizado en la trayectoria-> rompimiento eléctrico->descarga->chispa

Se apaga el AV para evitar descarga en todo el volumen de gas

#### Contador o cámara proporcional

Similar en construcción a un Geiger-Müller pero trabaja a un régimen diferente de AV, otro voltaje. Se generan avalanchas, no llegan a producir descargas o plasma, la carga es proporcional a la energía depositada

#### Cámaras multialámbricas proporcionales

Contienen muchos alambres ánodo paralelos entre dos planos, cátodos.

Operan similar a los tubos proporcionales.

Los cátodos pudieran ser placas o tiras de lámina para ganar adicionalmente información de la posición.





#### Cámaras de deriva

Los alambres junto con las paredes electrodos forman el campo de forma que sea muy uniforme, haciendo "celdas de deriva" cada una con un alambre ánodo.

En cada celda de deriva los e liberados se mueven al ánodo con una avalancha multiplicativa cerca del alambre.

El tiempo de llegada de los pulsos dan información de la distancia de la partícula al alambre ánodo; la razón de los pulsos en los extremos nos dice la posición a lo largo del ánodo.



Figura 17. Esquema de una celda de cámara de deriva.

#### **Detectores de Centelleo**

Los materiales centelleadores producen un centelleo de luz cuando la radiación pasa por ellos, la detección implica dos pasos: Absorción de la energía de la radiación incidente y producción de un fotón y la amplificación de la luz con un fotomultiplicador (PMT) o un fotodiodo.

Se clasifican como orgánicos, inorgánicos segun la substancia centelleadora y líquidos, solidos o gaseosos seún su estado. Los orgánicos líquidos son económicos, pero "messy". Los inorgánicos tienen decaimiento rápido, longitud de atenuación larga, su espectro de emisión es muy adecuada. Los sólidos se maquinan al gusto, su tamaño es el que sea.

Entre los inorgánicos tenemos los cristales de BGO, Nal y CsI, estos tienen excelente resolución gamma pero lento tiempo de decaimiento, alta densidad, son compactos

#### **Detectores de Semiconductor**

También son llamadas detectores de estado sólido, para partículas se usa detectores de **Si**, para Gamma de bajas energías y R-X se usan detectores de **Ge.** El **Si** tiene propiedades adecuado para ser detector, baja energía de ionización (buen tamaño de señal), largo camino libre medio que se traduce en buena eficiencia para colección de carga). Alta movilidad por lo que la colección de carga es rápida, baja dispersión múltiple por baja Z, área de depleción (área útil) muy grande.

Difusión de cargas sin voltaje. Además, su tecnología está muy desarrollada. Entre sus desventajas están el costo y que se dañan con radiación. También se les conoce como Cámaras de ionización de estado sólido. Actualmente el mas usado es el conocido como Semiconductor intrínsecos, que son semiconductores (Ge o Si) sin impurezas, a 0 grados K todos los electrones están en la banda de valencia, no fluye corriente ni con campo, a temperatura ambiente los e pasan a la banda de valencia.



Figura 18.

-	Si	Ge	GaAs	Diamond
Eg[eV]	1.12	0.67	1.35	5.5
n <sub>i</sub> (300K) [cm <sup>-3</sup> ]	1.45 x 10 <sup>10</sup>	2.4 x 10 <sup>13</sup>	1.8 x 10 <sup>6</sup>	< 10 <sup>3</sup>

En esta tabla tenemos los valores en eV de la energía minima para producir una carga en el semiconductor y el número de cargas que se pueden obtener a 300 grados Kelvin, temperatura ambiente.

#### **Radiación Cherenkov**

Una partícula cargada con velocidad  $\beta$   $\beta = v/c$  en un medio con índice de refracción n puede emitir luz a lo largo de un frente de onda cónico si la velocidad de la partícula es mayor que la velocidad de fase de la luz en ese medio: c/n. El ángulo de este cono esta relacionado con la velocidad de la partícula:

$$\cos\theta = \frac{c/nt}{\beta ct} = \frac{1}{\beta n}$$

y el número de fotones se puede calcular

$$N\left[\lambda_{1} \rightarrow \lambda_{2}\right] = 4.6 \cdot 10^{6} \left[\frac{1}{\lambda_{2}(A)} - \frac{1}{\lambda_{1}(A)}\right] L(cm) \sin^{2}\theta$$

medium	n	$\theta_{max}(\beta=1)$	$N_{ph} (eV^{-1} cm^{-1})$
air	1.000283	1.36	0.208
isobutane	1.00127	2.89	0.941
water	1.33	41.2	160.8
quartz	1.46	46.7	196.4

donde *n* es el índice de refracción,  $\lambda$ , las longitudes de onda donde calculamos y *L* la longitud donde medimos.

Actualmente la luz Cherenkov es muy usada para estudiar radiación de alta y muy alta energía.

El ángulo nos da la velocidad de la partícula cargada en estudio y la cantidad de fotones puede ser proporcional a la energía.

Los principales dispositivos que aprovechan esta emisión son en altas energías usando los anillos resultantes de hacer un corte en los conos de luz o contando los fotones. En astrofísica se usa observando la emisión cherenkov en la atmósfera o a nivel de tierra en la radiación producida en agua.

#### Detectores de transición

Se emite radiación electromagnética cuando una partícula cargada atraviesa un medio con un índice de refracción discontinuo, principalmente si este cambio es abrupto como pudiera ser entre vacío y dieléctrico. El número de fotones es pequeño por lo que se requieren muchas transiciones como una pila de capas radiativas intercaladas con detectores activos. Los fotones son del orden de KeV y se emiten a ángulo pequeño. En varios lugares se usa, pero un ejemplo muy elaborado es el detector TRT del experimento ATLAS del acelerador LHC del CERN. Consiste de 300,000 popotes de plástico ahogados en plástico rellenos de Xe con un electrodo central

con

#### Detectores de neutrones

Los neutrones son partícula neutra, sin interacción electromagnética, por lo que su deteccion se basan en interacciones indirectas. Principalmente dos métodos: por dispersión donde los núcleos en retroceso ionizan el material alrededor, esto es solo efectivo con núcleos ligeros (H, He) y reacciones nucleares donde se detectan productos de la reacción (gamma, protones, alfa).

Se tiene que la sección de interacción es fuertemente dependiente de la energía así que para diferentes energías diferentes técnicas.

Se llaman neutrones lentos si su energia está debajo del corte del Cd, ~0.5 eV, los demas los llamaremos neutrones rápidos

Los **neutrones lentos o termicos** los detectamos con las reacciones <sup>10</sup>B(n,a) en un tubo BF3 o <sup>6</sup>Li(n,a).

A los **Neutrones rápidos** los detectamos conla reaccion  ${}^{3}$ He(n,a) o con centelleadores con Li. Tambien se usan detectores de retroceso de H

#### Detctores de neutrinos

Los neutrinos pueden atravesar la tierra sin interaccionar pues no tienen carga electrica y prácticamente no tienen masa. Interacciona por interacción débil. Dos detectores de de grandes dimensiones son el **Supe Kamio-kande**, en Japon, 1km bajo tierra y **ICECUBE** enterrado en el polo sur, consta de 1km<sup>3</sup> de hielo a 1.5km de profundidad.



Figura 19.

#### **Radiación Cherenkov**

Esta radiación es una forma de perdida de energía y se observa cuando una partícula cargada se mueve en un medio a una velocidad mayor que la velocidad de la luz EN ESE MEDIO. Esto ocurre en cualquier medio que no sea el vacío.

Esta luz cherenkov se observa como una luz azul, ver figura 20 aunque el espectro de emisión es continuo y en todas las frecuencias, pero el medio y los ojos responden diferente haciendo visible solo el azul. La explicación física es similar a una onda de choque. Al pasar una partícula cargada por un medio, esta polariza en forma radial el medio, pero si se mueve a mayor velocidad que el campo eléctrico generado por la



Figura 20. Luz Cherencov causada por partículas cargadas en por un reactor nuclear en agua.

partícula, la polarización en un ángulo muy especifico será constructivo mientras que en todas las demás direcciones será destructivo, se neutraliza, ver figura 21



Figura 21. A la izquierda se ve el fenómeno de polarización de las moléculas del medio por el paso de una partícula cargada a una velocidad menor que la de la luz en ese medio. A la derecha se ve lo mismo pero la partícula va mas rápida que la velocidad de la luz en ese medio y solo están polarizadas un cono atrás de ella.

En la construcción y funcionamiento de los distintos experimentos y observatorios que se encargan de estudiar estos rayos cósmicos, se combinan diferentes técnicas y tipos de detectores como los que se han descrito, dependiendo de los objetivos que se planteé cada experimento y observatorio, será las diferentes técnicas y detectores que utilizará. A continuación describimos brevemente algunos de los mas representativos pero la lista es mucho mayor por lo que dejamos al lector (si es que esta interesado en esta área) que complemente esta lista.

## OBSERVATORIOS LABORATORIOS Y EXPERIMENTOS HESS



Figura 22. Los 5 telescopios HESS en medio del desierto de Namibia. Foto: WIkipedia.

#### The High Energy Stereoscopic System

Es un observatorio para rayos gamma de muy alta energía localizado en Namibia, África. Se compone de un sistema de 5 telescopios de cherenkov en la atmosfera (IACT) que observa gammas de decenas de GeV hasta decenas de TeV. Funciona desde 2002. Es una cooperación internacional de 260 científicos de 13 países. Cada telescopio es un arreglo de espejos enfocado a una cámara de PMT's. Son 4 telescopios de 12 m de diámetro y uno de 28 m de diámetro equivalentes a 108 m<sup>2</sup> y 614 m<sup>2</sup> de área reflectante. La cámara consta de 960 o 2049 PMT's. Están afocados a 10 km que es la altura media donde ocurre el cherenkov atmosférico. Su apertura es de 5° y tiene resolución de hasta segundos de arco.

### HAWC



Figura 23. Imagen del observatorio HAWC en su primera fase, al fondo, el Pico de Orizaba. https://www.hawc-observatory.org/

El Observatorio HAWC es un observatorio para estudiar los rayos gamas de la mas alta energía posible actualmente, proveniente de los eventos mas violentos del universo. Es producto de una cooperación México-EEUU a la cual se han unido científicos de Alemania, Corea, Costa Rica, y Polonia. Está construido a 4,100 m de altura en el estado de puebla, México, en las faldas del Pico de Orizaba y consta de 300 unidades de agua de 5 m de altura y 7 de diámetro instrumentadas con 4 PMT's cada uno. Toda la información es transmitida vía fibra óptica y satélite a los centros de procesamiento de México y EEUU. A diferencia de los telescopios de cherenkov en la atmosfera, este tipo de observatorios pueden operar las 24 horas debido a que detectan las partículas que llegan a cada unidad o detector. Cuando varios detectores registran el paso de partículas en un intervalo de tiempo de 125 nanosegundos, se considera que se ha detectado un evento. El tiempo relativo de detección entre detectores nos provee de la información para reconstruir el ángulo con el que el rayo cósmicos o rayo gamma incidió en la atmosfera.
## **Pierre Auger Observatory**



Figura 24. El Observatorio Pierre Auger, uno de sus tanques en primer plano con la via lactea en el cielo. Imagen www.symmetrymagazine.org.

El Observatorio Pierre Auger es un observatorio construido en una planicie conocida como la pampa amarilla en el oeste de Argentina. Estudia las partículas mas energéticas detectables usando una detección híbrida con detectores de cherenkov en agua en la superficie y fluorescencia en ultravioleta en la atmosfera. Uno de los principales objetivos de este observatorio es observar la atenuación del número de núcleos de hidrogeno (protones) que llegan a la tierra con una energía de 10<sup>20</sup> eV. Esto se ha planteado ya que los fotones del fondo de microondas (Microwave Background), tiene una probabilidad no despreciable de colisionar con núcleos de muy alta energía, y aunque en esta colisión el fotón tiene poca energía, se producirá una partícula llamada pión que se llevará una fracción considerable de la energía, y este pión decae muy rápidamente en muones, neutrinos y fotones; por lo tanto el número de nucleos detectados en la observatorio se vera disminuido. A este efecto se le conoce como el corte GZK (por Greinsen, Zatsepin Kuzmin), y pone un límite a la energía de las partículas que podemos detectar así como a la distancia desde la cual viajan.

# Fermi-LAT Satélite



Figura 25. El satélite. Imagen: NASA's Goddard Space Flight Center/Conceptual Image Lab. <u>https://fermi.gsfc.nasa.gov/</u>

El satélite Fermi-LAT es un telescopio diseñado para observar rayos gammas desde 8 keV hasta 300 GeV. Fermi lleva consigo dos instrumentos, el LAT, telescopio de gran área y el GBM, monitor de ráfagas de rayos gamma (GRB's). Tiene un gran ángulo de visión que cubre 1/5 del cielo en un momento dado, cubre la totalidad del cielo cada 3 horas. El método de funcionar es: el fotón pasa por 16 laminas de tungsteno donde lo convierten a pareja electrón positrón y mediante detectores de estado solido intercalados miden la posición y deducen la trayectoria así como mediante un calorímetro al final la energía, También cuentan con un sistema de anti-coincidencia para limpiar el ruido de rayos cósmicos.



Figura 26. Dibujo artístico del AMS-02 actualmente en la Estación orbital internacional. https://ams02.space/what-is-ams/ams-in-nutshell

El detector Alpha Magnetic Spectrometer (AMS) es un detector de partículas que ve cualquier partícula cargada que pase por ella encontrándose fijo en la International Space Station (ISS). Una de sus misiones mas importante es estudiar la antimateria del espacio. También ha hecho mediciones de mucha precisión de la composición del flujo de rayos cósmicos. Al estar situado en el espacio, el rango de energía en que realiza sus medidas es mucho menor al que alcanza el observatorio Auger, sin embargo su precisión para identificar los rayos cósmicos (Z) es muy alta.

# Super Kamiokande



Figura 27. Interior del volumen detector del supe-kamiocande. https://www-sk.icrr.u-tokyo.ac.jp/en/pr/

### Supe-Kamiokande

Observatorio de neutrinos, en particular para detectar neutrinos solares y atmosféricos. Se encuentra en una mina a 1000 m de profundidad en Japón. EL detector consta de un volumen de 50,000 toneladas de agua rodeados por 11,000 tubos PMT. El principio que sigue es que al interactuar un neutrino con las moléculas de agua produzca partículas cargadas cuya luz cherenkov al llegar a las paredes será detectado por los PMT y según su morfología se podrá detectar dirección y tipo de neutrino pasando por las partículas que generó el neutrino.

## Icecube



Figura 28. Parte sobresaliente sobre el hielo del laboratorio IceCube. https://icecube.wisc.edu/gallery/

El observatorio IceCube fue construido con la idea de observar el universo desde el polo sur. Es un detector de neutrinos mediante detectores enterrados en el hielo cubriendo un volumen de 1 km cubico de hielo a profundidades de hasta 2.5 Km. Consta de 5,160 módulos esféricos con un tubo fotomultiplicador (PMT)de 10 pulgadas y electrónica asociada encapsulada. El principio es que los neutrinos interaccionan con las moléculas del agua del hielo generando partículas cargadas como electrones, muones o taus, que en el hielo, dada su energía y por tanto su velocidad, emiten fotones de luz cherenkov que ven los PMT's. Detecta neutrinos en el intervalo de energías de 10<sup>7</sup> a 10<sup>21</sup> eV.

## **SNOLAB**



Figura 29. Detector de neutrinos, ONS, consistente en 1000 toneladas de agua pesada D<sub>2</sub>O, para observar luz cherenkov. https://www.snolab.ca/

SNOLAB es un laboratorio subterráneo en Canadá que al estar ubicado a una profundidad de 2 km proporciona un blindaje natural para mediciones con bajo fondo pues aísla de la radiación cósmica. Estudia aspectos de astrofísica y materia oscura, así como también cuenta con laboratorios de geología y biología. Uno de los campos importantes es la detección de neutrinos. En este campo resalta el experimento PICO que consiste de una cámara de burbujas de 57 kg de C<sub>3</sub>F<sub>8</sub> y que mediante diferentes detectores incluyendo micrófonos pueden detectar lo que pudiera ser la materia oscura de baja masa.

## CERN



Figura 30. Vista parcia del cuarto de control del acelerador LHC, en el CERN, Ginebra, Suiza. https://home.cern/resources/image/accelerators/cern-control-centre-images-gallery

El CERN por sus siglas de Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire, es la casa del LHC (Large Hadron Collider) aceleradores conocidos por todos por su pasado gran logro de encontrar el bosón de Higgs en 2012. En el CERN trabajan mas de 10,000 científicos de mas de 100 países además de miles de técnicos y estudiante. Este laboratorio multinacional consta de muchos laboratorios de diferentes tamaños incluidos muchos aceleradores donde el mas grande es el LHC. Este es un acelerador subterráneo a un promedio de 150 m y que con su circunferencia de 27 km pasa por debajo de Francia y Suiza. En el LHC se aceleran paquetes en dos direcciones opuestas en conductos separados. Tiene 4 experimentos principales en los 4 puntos de cruce de los haces, ATLAS, ALICE, LHCb y CMS. Actualmente se aceleran protones y núcleos de plomo haciéndolos colisionar alcanzándose energías de 13 TeV en el centro de masa. Las secciones eficaces medidas en CERN ayudan a elaborar mejores modelos y simulaciones de cuales son las interacciones y la energía de las partículas que se producen en la colisiones de rayos cósmicos y moléculas de aire de nuestra atmosfera. Estos datos son esenciales para observatorios como Auger o HAWC reconstruyan la energía y dirección de los rayos cósmicos que detectan.

# CONCLUSIÓN

Dentro de la física experimental y en especial en física de altas energías y la astrofísica hay muchos campos nuevos que actualmente se abren continuamente gracias a la nueva instrumentación que se está desarrollando. Los principios de esta, en algunos casos son de larga historia, pero la tecnología, gracias a la presión de los físicos explora ideas que generan nuevas herramientas, muchas, impresionantes. Dentro de los nuevos instrumentos de investigación experimental destacan los detectores de radiación que son una extensión de nuestros sentidos. Con esto encontramos que hay mucho por entender pues "vemos" nuevas cosas continuamente.

Cabe mencionar que en estos campos de la investigación el trabajo en grupo, en grandes colaboraciones, se ha vuelto la forma mas común por la necesidad de trabajar en muchos aspectos del tema al mismo tiempo y luego converger. En otros casos la cantidad de datos es tan grande que ser requieren grandes grupos de científicos para entenderla. En todo caso, México está en esa dinámica y la participación de Investigadores y estudiantes mexicanos se ve en todas las grandes colaboraciones científicas del mundo. Esto ultimo es importante resaltar pues es una puerta abierta a los actuales estudiantes para estos grandes laboratorios.

### Materia cuántica y dinámica por mediciones

Santiago F. Caballero-Benítez<sup>a</sup>

Instituto de Física, LSCSC-LANMAC, Universidad Nacional Autónoma de México,

Apdo. Postal 20-364, México D. F. 01000, México.

(Dated: January 31, 2023)

This article discusses some details of the course on "Quantum matter and measurement induced dynamics" given in the Summer School of Physics XXIX at UNAM in 2022. The notes describe useful concepts to study the dynamics induced by photon losses, the method for simulation (quantum trajectories) is summarized and details of models in optical lattices and high-Q cavities are given. The notes are in Spanish.

En este artículo se discuten algunos detalles del curso sobre "Materia cuántica y dinámica inducida por medición" de la escuela de verano de Física XXIX (2022) en la UNAM. Las notas describen conceptos útiles para estudiar la dinámica emergente por efectos de medición de fotones, se resume el método para simulación (trayectorias cuánticas) y se dan detalles de modelos de materia cuántica y cavidades de alta reflectancia.

Las notas del curso son una introducción sobre el método implementado de trayectorias cuánticas para estudiar la dinámica inducida en sistemas en redes ópticas y cavidades de alta reflectancia. Se estudia la dinámica inducida en el régimen donde la tasa de pérdida de fotones ( $\kappa$ ) es grande con respecto a la desintonía de la cavidad entre el bombeo y la frecuencia de la cavidad ( $\Delta = \omega_c - \omega_p$ ),  $\kappa \gg |\Delta|$ :

- Materia cuántica, modelos de Hubbard y redes ópticas
- Ingeniería de estados cuánticos con correlaciones vía retro-acción de la pérdida de fotones
- Retroalimentación y control de criticalidad
- Conclusiones

#### I. MATERIA CUÁNTICA, MODELOS DE HUBBARD Y REDES ÓPTICAS

Los recientes avances en el control de los sistemas atómicos han permitido generar una nueva generación de simuladores cuánticos [1, 2]. Los modelos más simples con interacciones de muchos cuerpos típicos de materia cuántica ultrafría en redes ópticas [3, 4] son el modelo de Hubbard de fermiones  $(\mathcal{H}^f)$ :

$$\mathcal{H}^{f} = -J \sum_{\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \hat{f}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{f}_{i\sigma} + \text{H.c.} \right) + U \sum_{i} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}$$
(1)

y modelo de Bose-Hubbard ( $\mathcal{H}^b$ ):

$$\mathcal{H}^{b} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{b}_{i}^{\dagger} \hat{b}_{j} + \text{H.c.}) + \frac{U}{2} \sum_{i} \hat{n}_{i} (\hat{n}_{i} - 1)$$
<sup>(2)</sup>

Los términos de J representa la energía cinética ( $J \sim \text{kHz}$ ) y los términos con U la energía de interacción de muchos cuerpos, que puede ir más allá de perturbaciones y puede generar transiciones de fase cuánticas [5]. Estos modelos representan el comportamiento de los átomos con diferentes propiedades estadísticas (bosones/fermiones) en segunda cuantización que están en el límite donde los procesos de baja energía dominan. Para lograr estos sistemas se emplean varias etapas de enfriamiento [6] hasta llegar a temperaturas de  $10^{-9}$  a  $10^{-6}$  K y después son atrapados por láseres que generan una estructura de red (red óptica) que puede ser controlada de manera externa paramétricamentee [7, 8]. Los parámetros del sistema con controlados por las amplitudes de los láseres y las colisiones de baja energía, típicamente de onda-s via la longitud de dispersión a. Dependiendo de los átomos en el experimento, esta longitud de dispersión

<sup>&</sup>lt;sup>a</sup> Corresponding author: scaballero@fisica.unam.mx



FIG. 1: Esquema general de la dinámica inducida por medición. Izquierda: sistema sin estructura. Centro: medición débil. Derecha: estructura emergente inducida, i.e. dos modos espaciales en una red cuadrada.

incluso puede ser controlada de manera externa mediante un campo magnético externo constante y la resonancia de Feshbach que se genera [9], a = a(B). Los parámetros de los modelos se relacionan de la siguiente manera:

$$J = \int \mathrm{dx}^{D} w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i})^{*} \left(\frac{\nabla^{2}}{2m} - V_{\mathrm{OL}}(\mathbf{x})\right) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{j})$$
(3)

$$U = \frac{4\pi\hbar a}{m} \int d\mathbf{x}^D |w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)|^4$$
(4)

donde i, j son los vecinos más cercanos,  $w(\mathbf{x})$  son las funciones de Wannier localizadas [3], m la masa de los átomos fermiones (<sup>6</sup>Li [10], <sup>40</sup>K [11]) o bosones (<sup>7</sup>Li [12], <sup>23</sup>Na [13], <sup>87</sup>Rb [14]) y D la cantidad de dimensiones espaciales. La longitud de dispersión de onda-s es  $a = a_{s,\uparrow\downarrow}$  para el caso de fermiones donde se se toman en cuenta colisiones entre diferentes estados magnéticos atómicos (debido al bloqueo de Pauli) y en el caso de bosones se consideran átomos con el mismo estado,  $a = a_s$ . Otros detalles relevantes sobre la analogía con sistemas electrónicos en la aproximación de enlace fuerte y detalles sobre redes ópticas se pueden encontrar en [3, 15]. Típicamente para una red hiper-cúbica de dimensión D uno tiene para el potencial de la red óptica,

$$V_{\rm OL}(\mathbf{x}) = \sum_{\eta=1}^{D} V_0 \sin^2(k_\eta x_\eta)$$
(5)

donde  $k_{\eta}$  es el vector de onda de la luz laser incidente formando una onda estacionaria en la dirección  $\hat{e}_{\eta}$ ,  $x_{\eta}$  es la coordenada (i. e. x, y, z, ...). Para cada "dimensión"  $\eta$  tenemos vectores unitarios  $\hat{e}_{\eta}$ .

### II. INGENIERÍA DE ESTADOS CUÁNTICOS CON CORRELACIONES VÍA RETRO-ACCIÓN DE LA PÉRDIDA DE FOTONES

#### A. Esquema general de dinámica por medición

Recientemente se han logrado experimentos de átomos ultrafríos en redes ópticas clásicas dentro de una cavidad de alta reflectancia [16–18]. Estos arreglos típicamente se han realizado con cavidades de onda estacionaria pero también se pueden considerar arreglos con cavidades de ondas viajeras [19]. También existen realizaciones de sistemas sin redes ópticas con múltiples cavidades [20, 21] o cavidades multi-modales [22]. En principio se puede colocar con posiciones arbitrarias los detectores de fotones que escapan la cavidad. Típicamente los detectores se colocan en los ejes de la cavidad, detrás de los espejos de la cavidad donde la amplitud de la señal de salida es máxima. En estos sistemas se puede estudiar el límite donde la pérdida de fotones es alta con respecto a otras escalas de energía en el sistema, concretamente la desintonía  $\Delta$ . En estas condiciones un escenario a estudiar es si la pérdida de fotones que cambia el estado del sistema de manera dinámica puede inducir estados con estructuras útiles. Por una estructura útil nos referimos a un estado que típicamente el sistema no soporta para bajas energías, como puede ser un estado con una simetría rota inducida u otro tipo de orden emergente, ver Fig.1. Para estudiar esta posibilidad se estudia de manera efectiva la evolución temporal condicionada del sistema por la pérdida de fotones utilizando el método de trayectorias cuánticas [23]. Para esto se construye el siguiente Hamiltoniano no-Hermitiano,

$$\mathcal{H}_{\rm NH} = \mathcal{H} - i\hat{c}^{\dagger}\hat{c} \tag{6}$$

46

donde

$$\hat{c} \approx \frac{\sqrt{2\kappa}g\hat{F}}{\Delta + i\kappa} \tag{7}$$

es el operador de salto cuántico de la trayectoria,  $\kappa$  es la tasa de pérdida de fotones de la cavidad, g es el acoplamiento luz materia,  $\Delta$  la desintonía y  $\hat{F}$  el operador que codifica la proyección espacial inducida por la luz bombeada al sistema en la materia y la cavidad. El operador  $\hat{F}$  esta dado por la proyección del traslape de los modos bombeados y los modos en la cavidad con componentes espaciales [24–30] y considerando adicionalmente grados internos de libertad (i.e. espín) [31–34],

$$\hat{F} = \sum_{\sigma, p, c} (\hat{D}_{\sigma p c} + \hat{B}_{\sigma p c}) \tag{8}$$

con modos de densidad,

$$\hat{D}_{\sigma pc} = \sum_{i} J_{ii}^{\sigma pc} \hat{m}_{\sigma i}^{\dagger} \hat{m}_{\sigma i}$$
<sup>(9)</sup>

y modos de enlace,

$$\hat{B}_{pc\sigma} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{\sigma pc} (\hat{m}_{\sigma i}^{\dagger} \hat{m}_{\sigma j} + \text{H.c.})$$
(10)

con las constantes de estructura,

$$J_{lm}^{\sigma pc} = \int \mathrm{dx}^D w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_l)^* u_{\sigma,c}(\mathbf{x})^* u_{\sigma,p}(\mathbf{x}) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_m)$$
(11)

La forma particular del operador de salto  $\hat{c}$  esta directamente relacionada con la eliminación adiabática de la luz, de tal forma que, la luz se encuentra esclavizada a la materia [35, 36].

Además, se requiere que después de que un salto cuántico ocurra (la medición de un fotón) el estado del sistema sea renormalizado tal que:

$$|\Psi'\rangle \to \frac{\hat{c}|\Psi\rangle}{\langle \hat{c}^{\dagger}\hat{c}\rangle} \tag{12}$$

de manera efectiva el Hamiltoniano no Hermitiano se puede escribir como [31]:

$$\mathcal{H}_{\rm NH} \approx \mathcal{H}^{f/b} - i \frac{\kappa g_{\rm eff}}{\Delta} \left( \hat{F}^{\dagger} \hat{F} + \hat{F} \hat{F}^{\dagger} \right) \tag{13}$$

 $con g_{\text{eff}} = \Delta |g|^2 / (\Delta^2 + \kappa^2)$  en el límite donde  $\kappa \gg \Delta$ . El número de fotones que escapa de la cavidad es  $N_{ph} = \langle \hat{a}^{\dagger} \hat{a} \rangle \propto \langle \hat{c}^{\dagger} \hat{c} \rangle$ .

Para estudiar los efectos de la dinámica inducida por medición se implementa el siguiente esquema de simulación.

#### B. Esquema del método de trayectorias

- 1. Iniciar el sistema en el estado base u otro estado arbitrario.
- 2. Generar un intervalo t y un número aleatorio r en el intervalo [0,1]
- 3. Propagar el sistema con el Hamiltoniano no Hermitiano hasta que la norma del estado es igual a r.
- 4. Aplicar el operador de salto cuántico (pérdida de un fotón) y renormalizar el estado con respecto a repetir 2 a 4 para un nuevo intervalo t'



FIG. 2: Oscilaciones gigantes inducidas en la densidad espacial por medición débil. El estado inicial es un estado homogéneo. Sistemas bosónicos (a,b,d), sistema fermiónico (c). (a) Un modo de luz inducido. (b) Dos modos de luz inducidos. (c) Tres modos de luz inducidos. (c) Modo de luz inducido en fermiones.(d) Modo de enlace inducido en bosones. Figura tomada de [31].

#### C. Galería de algunos resultados por dinámica inducida por mediciones

En general uno de los efectos de la medición débil es inducir el rompimiento de simetría espacial dinámico dependiendo de como los modos de luz inducidos acoplan espacialmente en el sistema ver [30, 31]. Se puede inducir diferente número de modos espaciales que en principio son detectables via la medición de las poblaciones por sitio [31] e incluso otras estructuras con coherencia más complicadas utilizando modos de enlace [29]. Esto es una consecuencia de la estructura del arreglo geométrico de la luz ver [27]. La medición compite con la dinámica típica del sistema con procesos de tunelaje y dinámica atómica que actúan de manera homogénea típicamente. Con interacciones es posible que el comportamiento de otras fases de la materia cuántica como pueden ser la presencia de aislantes sean modificadas cambiando los valores críticos de la emergencia del superfluido en el sistema de Bose-Hubbard por ejemplo, así como la destrucción o la protección de la existencia de pares en un sistema fermiónico (Hubbard) dependiendo del esquema de medición, ver [31]. Adicionalmente, es posible estabilizar órdenes en el sistema o incluso inducirlos sin interacciones (U = 0), como pueden ser la emergencia de la magnetización escalonada en el tiempo en sistemas fermiónicos con espín, Figuras 2 y 3, [32]. En [30], se encuentra que las oscilaciones gigantes inducidas por la medición débil son equivalentes a una fuerza estocástica cuasiperiódica aplicada al sistema. Otra manera de entender el fenómeno se presenta por medio del análisis de estabilidad de modelos efectivos via los exponentes de Lyapunov del sistema estocástico donde es claro que existe un regimen de competencia que a partir de un umbral crítico da lugar una inestabilidad que da lugar a que las oscilaciones gigantes en la densidad aparezcan de manera consistente estocásticamente en las travectorias [30]. Cabe recalcar que el comportamiento observado a nivel de travectorias

48



Figure 2. Measurement-induced AFM order in a single experimental run. (a) " e probability distribution FIG. 3: Emergencia de order anssered massered massered masters vois vale v best atentes net internet menore. (a) Distribución de la magnetic structure factor de la Schrödinger cat state. (D) Comparison between the magnetic structure factor de la Distribución de la magnetic structure factor de la magnetización escalona (a Nucher Vielande de potones à fullicula de la magnetización escalona (a Nucher Vielande) de potones à fullicula de time de normalización escalona (a Nucher Vielande) de potones à fullicula de time de normalización escalona (a Nucher Vielande) de potones à fullicula de time de normalización escalona (a Nucher Vielande) de potones à fullicula de time de normalización escalona (a Nucher Vielande) de potones à fullicula de time de normalización escalona (a Nucher Vielande) de [32]. (photocount rate) is proportional to  $S(\mathbf{Q})$ .  $(\gamma/J=1, U/J=0, N_{\uparrow}=N_{\downarrow}=4, L=8)$ .



the probability distribution of  $\langle \hat{M}_c \rangle$ , making it bimodal with two symmetric peaks around  $\langle \hat{M}_c \rangle = 0$  that reflects the degeneracy of  $\hat{a}_{1}^{\dagger}\hat{a}_{1}$ ." e evolution of such peaks depends on the ratio  $\gamma/J$  which determines whether the

FIG. 4: Optimizacion de anterioritation rando anticon de la magnetización pometizional esistema sermiónico de la magnetización pometización pometización de la magnetización de la magne particular series of quantum figures. ( $\frac{1}{2}$ ) the measurement cannot inhibit the dynamics and the tunneling of atoms across the optical lattice leads to an oscillatory behavior, that, in the case of bosons, can be described analytically<sup>42</sup>.

individuales arroja información reserver ser altioner in the quantum state estudione from the has disonal dyonesics is revealed by ante que el promedio de las trayectorias arroja resultados triviales, dado que las oscilaciones son de carácter aleatorio y tiene fases incoherentes, pero no así grupos representativos rde travectorias. Efectos de detección ineficiente no eliminan por completo la dinámica inducida por medición, para valores de hasta 10% no hay cambios significativos e incluso solo con un 1% de eficiencia se pueden observar lo efectos en las travectorias para escenarios bosónicos y fermiónicos [30, 32]. Adicionalmente es posible en alizar da esta duantum trajectory, we l nd that the measurement induces a strong peak at generatives a strange for diseño modificando la esta ados obscuros q =  $0 = \pi/d$  and creates an AFM state (Fig. 2). Importantly, the value of s(Q) is directly accessible to the experi-por diseño modificando la esta sindere probability for aphotor o estape the optical cavity in a (shafi) timblemente a distribute de probability for aphotor o estape the optical cavity in a (shafi) timblemente a distribute de probability for aphotor of stape the optical cavity in a (shafi) timblemente a distribute de probability for aphotor of stape the optical cavity in a (shafi) timblemente a distribute de probability for aphotor of stape the optical cavity in a (shafi) timblemente de stape de probability for aphotor de stape the optical cavity in a (shafi) timblemente de state emplear la siguiente ecuation de mailions en obsefective communitare fet For instead of the photocount rate. Note that the emergence of these intriguing quantum states is stochastic and varies depending on the speci! c quantum trajectory, i.e. a single experimental set of photodetections. However, thanks to the photons escaping from the cavity, it is possible to precisely determined when the SEM correlations are established and any subse-(14) quent dynamics can be frozen by increasing the depth of the optical lattice. " e resulting state can then be used for more advanced studies with applications to quantum simulations and quantum information. In contrast to para la evolución no Hernitina a vonces sudos da dos da dos experiments where a strong repulsion between the atoms is necessary for establishing AFM order our measurement scheme allows to obtain these states even for non-interacting fermions. Furthermore, the spatial  $\psi$  of the  $\hat{corr}$  ations imprinted by the measurement can be tuned chang-(15) ing the scattering angle and may lead to the realization of states with more complex spatial modulations of the donde el operador despuérate tization aneretore slobal light scattering will help to simulate e ects of long-range interactions in Fermi systems which are inaccessible in contemporary setups based on optical lattices with classical light.

Considering the case of interacting fermions we show that addressing only one of the two spin species a sects 49 the global density distribution and  $\hat{\mathbf{G}}$  uces  $\stackrel{\text{AFM}}{\overset{\text{C}}{c}} \stackrel{\text{C}}{\overset{\text{C}}{c}}$  cally, we consider the measurement operator (16)



#### III. **RETROALIMENTACIÓN Y CONTROL DE CRITICALIDAD**

Fig. 2. Probability distribution of  $\hat{N}_{odd} - \hat{N}_{even}$  for single quantum trajectories (Panels 1) and averages over 200 trajectories (Panels 2) for different values of the feedback gain z. Panel 3 shows the power spectrum of  $\langle \hat{N}_{odd} - \hat{N}_{even} \rangle$  averaged over 200 trajectories. In the absence of feedback [Panel (a),

FIG. 6: Control deddad frequencies of the population of the odd sites are visible only in a single trajectory. For z > z, [l'and (b), z = 1.23z] the imbalance between FIG. 6: Control deddad frequencies of the population of the odd sites are visible only in a single trajectory. For z > z, [l'and (b), z = 1.23z] the imbalance between FIG. 6: Control deddad frequencies of the population of the odd sites are visible only in a single trajectory. For z > z, [l'and (b), z = 1.23z] the imbalance between FIG. 6: Control deddad frequencies of the population of the odd sites are visible only in a single trajectory. For z > z, [l'and (b), z = 1.23z] the imbalance between FIG. 6: Control deddad frequencies of the population of the odd sites are visible only in a single trajectory. For z > z, [l'and (b), z = 1.23z] the imbalance between FIG. 6: Control deddad frequencies of the population of the odd sites are visible only in a single trajectory. For z > z, [l'and (b), z = 1.23z] the imbalance between FIG. 6: Control deddad frequencies of the population of the odd sites are visible only in the population of the populat Sistema sin retroaling state requery of the rectilency of the rectilence reader in real state requery density of the rectilence of the rec (c,1,2,3) Control de la frecuéncia de oscilación por la dinámica atómica. (d,1,2,3) Control de la frecuencia de oscilación abajo de la frecuencia natural de oscilación por la dinámica atómica. Figura tomada de [37].

0] the oscillations of the population of the odd sites are visible only in a single trajectory. For a

JI

w/J

1.23z.] the imbalance be

[Panel (b), z

Más allá de solo medir los fotones que escapan el sistema y afectan el estado cuántico al interior del sistema, se puede considerar la retroalimentación clásica del sistema. Esto se logra procesando la información de salida (fotodetecciones) y modificando en tiempo real los parámetros del sistema de acuerdo a la señal medida (i.e. la intensidad de los láseres que atrapan los átomos en la red óptica). Un esquema se ilustra en la Figura 5 [37]. Esto es posible debido a que existe en estos sistemas diferentes rangos de frecuencia de respuesta de cada componente, típicamente la respuesta electronica sucede en el rango de GHz, la respuesta de la cavidad es en MHz y la respuesta de los procesos atómicos es en kHz. De manera efectiva los cambios realizados para los átomos después del procesamiento de información y modificación de parámetros son instantáneos.

Utilizando este tipo de sistema es posible en primera instancia estabilizar el desbalance que emerge en el sistema (oscilaciones gigantes de la sección anterior) y se puede controlar la frecuencia de las oscilaciones en el sistema inducidas por la pérdida de fotones, Figura 6. También es posible estabilizar la emergencia de orden anti-ferromagnético en un sistema fermiónico [37].

Adicionalmente, al considerar la estabilización y control de estados es posible formular la pregunta si es posible 50 controlar incluso la criticalidad del sistema, modificando exponentes críticos y la posición de los mismos. Esto genera un nueva escenario donde se tiene un sistema cuántico que va más allá del paradigma disipativo. Recientemente,

estudios teóricos [38–40] han mostrado que es posible. Considerando dos modos en un condensado de Bose-Einstein (BEC) dentro de una cavidad tal que

$$\psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{L}}c_0 + \sqrt{\frac{2}{L}}c_1\cos(k_1x) \tag{17}$$

donde  $c_0$  corresponde a k = 0 y  $c_1$  a  $k = k_1$ . Después de manipulaciones algebraicas se llega al siguiente modelo efectivo [38, 39],

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} \approx \Delta \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + \omega_R \hat{S}_z + \frac{2}{\sqrt{N}} \hat{S}_x [g(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}) + GI(t)]$$
(18)

donde se despreciaron por simplicidad las interacciones de corto alcance entre átomos. Este es de manera efectiva un modelo de Dicke no Markoviano, donde la retroalimentación se considera en GI(t) con

$$I(t) \sim \int_0^t h(t-z) \mathcal{F}[x_\theta^{\text{out}}(z)] dz$$
(19)

$$= \int h(t-z)(\hat{a}e^{-i\theta} + \hat{a}^{\dagger}e^{i\theta})dz$$
(20)

I(t) es la señal de control con G el coeficiente de retroalimentación. El kernel  $h(x) \sim 1/(t_0 + x)^{s+1}$  permite modificar dependiendo de su forma funcional además del valor del valor crítico para la transición de fase, la criticalidad del sistema como función de s. Se tienen exponentes críticos de valor arbitrario para transición de fase que ocurre entre oscilaciones en los valores de expectación del los operadores de materia i.e.  $\hat{S}_x \approx \hat{X}$  y un valor estacionario con el ablandecimiento de los modos temporales [38]. La criticalidad se extrae a partir de:

$$\lim_{G \to G_c} \langle \hat{X}^2 \rangle = \frac{A}{\left| 1 - G/G_{\text{crit}} \right|^{\alpha}} + B \tag{21}$$

donde  $\alpha = \alpha(s)$ .

Se ha mostrado que es posible emplear un esquema de retroalimentación que modifica los puntos críticos incluso sin la necesidad de una cavidad en [39].

Esquemas similares de retroalimentación han sido empleados recientemente experimentalmente [41]. En estos experimentos fue posible estabilizar estados superradiantes supersólidos con tiempos de vida de más de un orden de magnitud con respecto al sistema sin retroalimentación.

#### **IV. CONCLUSIONES**

Mediante la manipulación en como se miden los fotones que escapan el sistema es posible generar estados cuánticos que típicamente no ocurren. Los estado que emergen de manera dinámica presentan propiedades interesantes y rompimientos de simetría. Utilizando esta ingeniería de estados por efectos de medición es posible modificar, estabilizar y generar comportamiento colectivo con posibles propiedades útiles para simulación cuántica. Adicionalmente, el uso de sistemas compuestos con retroalimentación ofrece una flexibilidad aun mayor en términos de la ingeniería de propiedades de estos sistemas de materia cuántica. Es posible, además de preparar estados de manera dinámica, controlar arbitrariamente como es que se llega a una fase de la materia en particular cerca de puntos críticos, modificar su posición y sus leyes de potencia. La combinación de los sistemas de materia cuántica con la óptica cuántica da nuevas herramientas para controlar las propiedades fundamentales de estos sistemas con posibles aplicaciones útiles para la simulación y el control cuántico avanzado.

#### V. AGRADECIMIENTOS

Se agradece a G. Mazzucchi, W. Kozlowski, D. A. Ivanov, T. Ivanova e I. B. Mekhov por contribuciones esenciales en el trabajo descrito en estas notas.

F. Schäfer, T. Fukuhara, S. Sugawa, et al. Tools for quantum simulation with ultracold atoms in optical lattices. Nat. Rev. Phys. 2, 411–425 (2020).

- [2] E. Altman, et. al. Quantum Simulators: Architectures and Opportunities. Phys. Rev. X Quantum 2, 017003 (2021)
- [3] M. Lewenstein, A. Sampera, and V. Ahufinger. Ultracold atoms in optical lattices: Simulating Quantum Many-Body Systems. Oxford University Press (2012).
- [4] Jaksch, D., Bruder, C., Cirac, J. I., Gardiner, C. W. and Zoller, P. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. Phys. Rev. Lett. 81, 3108 (1998).
- [5] S. Sachdev. Quantum Phase Transitions, Second Edition. Cambridge University Press (2011).
- [6] C. Foot. Atomic Physics. Oxford University Press (2005).
- [7] F. Schäfer, T. Fukuhara, S. Sugawa, Y. Takasu and Y. Takahashi. Tools for Quantum simulation with ultracold atoms in optical lattices. Nat. Rev. Phys. 2, 411 (2020).
- [8] I. Bloch, J. Dalibard and W. Zwerger, Many-body physics with ultracold gases. Rev. Mod. Phys. 8 885 (2008).
- [9] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, Feshbach Resonances in Ultracold Gases. Rev. Mod. Phys. 82, 1225-1286 (2010).
- [10] A. Omran, M. Boll, T. A. Hilker, K. Kleinlein, G. Salomon, I. Bloch, and C. Groß, Microscopic Observation of Pauli Blocking in Degenerate Fermionic Lattice Gases. *Phys. Rev. Lett.* **115**, 263001 (2015).
- [11] E. Cocchi, L. A. Miller, J. H. Drewes, M. Koschorreck, D. Pertot, F. Brennecke, and M. Köhl, Equation of State of the Two-Dimensional Hubbard Model. Phys. Rev. Lett. 116, 175301 (2016)
- [12] K. Kwon, Kyungtae K. J. Hur, S. J. Huh, and J. Choi, Site-resolved imaging of a bosonic Mott insulator of <sup>7</sup>Li atoms. Phys. Rev. A 105, 033323 (2022)
- [13] K. Xu, Y. Liu, J. R. Abo-Shaeer, T. Mukaiyama, J. K. Chin, D. E. Miller, W. Ketterle, Kevin M. Jones, and E. Tiesinga, Sodium Bose-Einstein condensates in an optical lattice. *Phys. Rev. A* 72, 043604 (2005).
- [14] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch and I. Bloch Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature* 415, 39–44 (2002).
- [15] S. F. Caballero-Benitez, Materia cuántica en cavidades de alta reflectancia (Many-body CQED). Memorias de la XXVIII Escuela de Verano en Física 2021; ISSN: 2594-2697, Universidad Nacional Autónoma de México (2022), arXiv:2201.06641 (2022).
- [16] J. Klinder, H. Keßler, M. Reza Bakhtiari, M. Thorwart, and A. Hemmerich, Observation of a Superradiant Mott Insulator in the Dicke-Hubbard Model. Phys. Rev. Lett. 115, 230403 (2015).
- [17] R. Landig, et. al. Quantum phases from competing short- and long-range interactions in an optical lattice. Nature 532, 476 (2016).
- [18] L. Hrubya, N. Dogra, M. Landini, T. Donner, and T. Esslinger, Metastability and avalanche dynamics in strongly correlated gases with long-range interaction, PNAS 115 (13) 3279-3284 (2018).
- [19] I. B. Mekhov and H. Ritsch, Quantum Optics with Quantum Gases. Laser Phys. 19, 610 (2009).
- [20] J. Léonard, A. Morales, P. Zupancic, T. Esslinger, and T. Donner. Supersolid formation in a quantum gas breaking a continuous translational symmetry. *Nature* 543, 87 (2017).
- [21] A. Morales, P. Zupancic, J. Léonard, T. Esslinger, and T. Donner. Coupling two order parameters in a quantum gas. Nat. Mat. 17, 686 (2018).
- [22] A. J. Kollár, A. T. Papageorge, K. Baumann, M. A. Armen, and B. L. Lev, An adjustable-length cavity and Bose–Einstein condensate apparatus for multimode cavity QED. New J. Phys. 17, 043012 (2015).
- [23] H. M. Wiseman and G. J. Milburn, Quantum Measurement and Control (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
- [24] S. F. Caballero-Benitez, and I. B. Mekhov, Quantum optical lattices for emergent many-body phases of ultracold atoms. *Phys. Rev. Lett.* **115**, 243604 (2015).
- [25] S. F. Caballero-Benitez, G. Mazzucchi, and I. B. Mekhov, Quantum simulators based on the global collective light-matter interaction. *Phys. Rev. A* 93, 063632 (2016).
- [26] S. F. Caballero-Benitez, and I. B. Mekhov, Bond order via light-induced synthetic many-body interactions of ultracold atoms in optical lattices. New J. Phys. 18, 113010 (2016).
- [27] W. Kozlowski, S. F. Caballero-Benitez, and I. B. Mekhov, Probing Matter-Field and Atom-Number Correlations in Optical Lattices by Global Nondestructive Addressing. *Phys. Rev. A* 92, 013613 (2015).
- [28] W. Kozlowski, S. F. Caballero-Benitez and I. B. Mekhov. Non-Hermitian Dynamics in the Quantum Zeno Limit. Phys. Rev. A 94, 012123 (2016)
- [29] W. Kozlowski, S. F. Caballero-Benitez and I. B. Mekhov. Quantum State Reduction by Matter-Phase-Related Measurements in Optical Lattices. Sci. Rep. 7, 42597 (2017).
- [30] G. Mazzucchi, W. Kozlowski, S. F. Caballero-Benitez, I. B. Mekhov. Collective dynamics of multimode bosonic systems induced by weak quantum measurement. New J. Phys. 18, 73017 (2016).
- [31] G. Mazzucchi, W. Kozlowski, S. F. Caballero-Benitez, T. J. Elliott, and I. B. Mekhov, Quantum measurement-induced dynamics of many-body ultracold bosonic and fermionic systems in optical lattices. *Phys. Rev. A* 93, 023632 (2016).
- [32] G. Mazzucchi, S. F. Caballero-Benitez, and I. B. Mekhov, Quantum measurement-induced antiferromagnetic order and density modulations in ultracold Fermi gases in optical lattices. Sci. Rep. 6, 31196 (2016).
- [33] A. Camacho-Guardian, R. Paredes, and S. F. Caballero-Benitez, Quantum Simulation of Competing Orders with Fermions in Quantum Optical Lattices. *Phys. Rev. A* 96, 051602(R) (2017)
- [34] K. Lozano-Mendez, A. H. Casares and S. F. Caballero-Benitez. Spin Entanglement and Magnetic Competition via Longrange Interactions in Spinor Quantum Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* **128**, 080601 (2022).
- [35] C. Maschler, I. B. Mekhov, and H. Ritsch, Ultracold atoms in optical lattices generated by quantized light fields. Eur. 52 Phys. J. D 46, 545-560 (2008).

- [36] S. F. Caballero-Benitez, and I. B. Mekhov, Quantum properties of light scattered from structured many-body phases of ultracold atoms in quantum optical lattices. New J. Phys. 17 123023 (2015).
- [37] G. Mazzucchi, S. F. Caballero-Benitez, D. A. Ivanov and I. B. Mekhov. Quantum optical feedback control for creating strong correlations in many-body systems. Optica 3(11), 1213 (2016).
- [38] D. A. Ivanov, T. Yu. Ivanova, S. F. Caballero-Benitez, and I. B. Mekhov, Feedback-Induced Quantum Phase Transitions Using Weak Measurements. *Phys. Rev. Lett.* **124**, 010603 (2020)
- [39] D. A. Ivanov, T. Yu. Ivanova, S. F. Caballero-Benitez, and I. B. Mekhov, Cavityless self-organization of ultracold atoms due to the feedback-induced phase transition. Sci. Rep. 10, 10550 (2020).
- [40] D. A. Ivanov, T. Yu. Ivanova, S. F. Caballero-Benitez, and I. B. Mekhov, Tuning the universality class of phase transitions by feedback: open quantum systems beyond dissipation. *Phys. Rev. A* 104, 033719 (2021).
- [41] K. Kroeger, N. Dogra, R. Rosa-Medina, M. Paluch, F. Ferri, T. Donner and T. Esslinger, Continuous feedback on a quantum gas coupled to an optical cavity. New J. Phys 22, 033020 (2020).

### Condensados de Bose-Einstein de Excitones-Polaritones de Frenkel

A. Camacho-Guardian<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física Química, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México,

Apartado Postal 20-364, Ciudad de México C.P. 01000, Mexico

(Dated: August 1, 2022)

En microcavidades orgánicas, el acoplamiento entre las excitaciones fundamentales de las estructuras moleculares y la luz puede dar lugar a la formación de excitones-polaritones a temperatura ambiente. Bajo condiciones adecuadas, los excitones-polaritones pueden formar estados colectivos de luz y materia como la condensación de Bose-Einstein. En estas notas revisaremos el modelo microscópico que da lugar a la formación de excitones-polaritones de Frenkel. Mostraremos que los excitones-polaritones de Frenkel exhiben el fenómeno de condensación de Bose-Einstein y se derivará una teoría efectiva para describir al condensado de Bose-Einstein incluyendo sus interacciones. Se demostrará que los excitones-polaritones soportan estados superfluidos y dan lugar a biestabilidad ópticas.

#### I. INTRODUCCIÓN

El fenómeno de condensación de Bose-Einstein inicialmente se refirió a la población macroscópica de un modo cuántico en un sistema ideal [1], a lo que se conoce como el condensado. Sin embargo, la rica fenomenología en sistemas atómicos como la superfluidez [2], vórtices cuánticos [3], turbulencia cuántica [4], radiación de Cherenkov [5], y otros requiere de adaptar la definición de condensación para incluir los efectos de interacciones atómicos responsables de dichos fenómenos. El principio básico de condensación de Bose-Einstein no esta restringido a sistemas atómicos y se presenta también en sistemas híbridos de luz-materia conocidos como excitones-polaritones [6].



FIG. 1: (a) Excitones-polariones de Frenkel formados por el acoplamiento colectivo de excitaciones moleculares a fotones de cavidad. (b) Diagrama relevante de energías: El acoplamiento entre fotones de cavidad y un excitón da lugar a dos ramas polaritónicas denotadas por polaritón superior e inferior.

**Excitones-polaritones.** Los excitones-polaritones son partículas híbridas de luz-materia formadas cuando las excitaciones fundamentales se acoplan fuertemente al campo electromagnético y no es posible separar a los estados de materia de los de la luz [7]. La hibridización de los modos fundamentales define a los excitones-polaritones los cuales poseen simultáneamente propiedades de luz y de materia. De la luz heredan la coherencia y su transferencia "ultra-rápida", de la materia heredan las interacciones atómicas. Excitones-polaritones han sido realizados en distintas plataformas, que por convención se dividen en dos tipos:

**Excitones de Wannier-Mott.** Los excitones de Wannier-Mott consisten en un estado ligado electrón-hueco en un semiconductor, en el cual la pareja (electrón-hueco) no esta localizada a la posición del cristal [8], esto es, la extensión espacial del par excede la constante de red del cristal. En dos dimensiones, los efectos excitónicos se pronuncian y es posible la formación de excitones-polaritones [7]. Excitones-polaritones han sido reportados experimentalmente en distintos tipos de semiconductores y han permitido la realización de condensados de Bose-Einstein [9], superfluidez [10], 54 resonancias de Feshbach polaritonicas [11], y han emergido como una plataforma sin paralelo para el estudio de fases cuánticas electrónicas y excitónicas fuertemente correlacionadas [12].

**Excitones de Frenkel.** Los excitones de Frenkel aparecen generalmente en moléculas y polímeros y surgen cuando un electrón cambia de estado de energía debido a la intracción con la luz. Los excitones de Frenkel se caracterizan por su por su localización espacial [13], donde la pareja electrón-hueco se encuentra en la posición del cristal. Los excitones de Frenkel contrastan con los excitones de Wannier pues estos primeros poseen energías de ligadura mucho mayores [14], lo que permite la observación experimental de excitones de Frenkel a temperatura ambiente. Aunque el acoplamiento entre una sola molécula a un modo fotónico es generalmente débil, al embeber sistemas de muchas moléculas, el acoplamiento luz-materia se incrementa y se permite la formación de excitones-polaritones en el régimen de acoplamiento fuerte de luz-materia [15].

Excitones-polaritones de Frenkel han demostrado ser una plataforma versátil para estudiar fases exóticas de luzmateria de muchos cuerpos que a diferencia de los excitones de Wannier-Mott surgen a temperatura ambiente. Dicha fenomenología incluye la condensación de Bose-Einstein [16], superfluidez [17], láseres [18], y otros, todos estos fenómenos, se insiste a temperatura ambiente. Adicionalmente, los excitones-polaritones de Frenkel son una herramienta prometedora para el control y manipulación de procesos moleculares [19].

Polaritones de Frenkel han atraído considerablemente la atención de la comunidad científica debido a su versatilidad, potencial aplicaciones y la habilidad de producirlos a temperatura ambiente [20]. El interés de la comunidad reside en la posibilidad de generar luz cuántica de forma eficiente, redes ópticas polaritónicas y computación cuántica, transistores ópticos, interacciones resonantes entre polaritones, fases cuánticas de muchos cuerpos fuera de equilibrio termodinámico, así como para controlar y modificar la foto-física y química de moléculas orgánicas. Sin embargo, aunque se ha progresado en teoría y experimentos en el estudio de acoplamiento colectivo de moléculas a la luz, a la fecha, se carece de teorías realistas que incluyan la estructura interna de las moléculas: grados rotacionales y vibracionales. El poco entendimiento de la influencia de estos grados de libertad limita seriamente el desarrollo de aplicaciones tecnológicas [21].

#### II. MODELO

**Modelo microscópico.** Desde la perspectiva molecular, es posible promover electrones del órbital molecular más alto ocupado (*highest occupied molecular orbital*) a su primer orbital molecular libre (*lowest unoccupied molecular orbital*) a través de la absorción de un fotón cuya energía empata con la energía de la transición. El proceso de excitación electrónica puede ser aproximado como un sistema de dos niveles (un electrón no puede ser excitado dos veces). Al embeber un sistema formado por N moléculas en una microcavidad como se muestra en la figura 1 el Hamiltoniano que describe al sistema es

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \sum_{i} \epsilon_{i} \hat{\sigma}_{i}^{\dagger} \hat{\sigma}_{i} + \sum_{i,\mathbf{k}} g\left(\hat{\sigma}_{i}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{i}} + \mathrm{H.c}\right),$$
(1)

en este caso, los operadores  $\sigma_i^{\dagger}$  denotan los operadores que excitan una molécula en la posición  $\mathbf{r}_i$  de su estado base, la energía de la excitación es  $\epsilon_i$ . En el Apéndice a estas notas se discuten los aspectos más generales del formalismo de segunda cuantización. Por otro lado, el acoplamiento luz-materia de una molécula individual con el campo de luz esta dado por g. La dispersión de la luz dentro de la cavidad

$$\omega_{\mathbf{k}} = c \sqrt{k^2 + \left(\frac{2\pi m}{L}\right)^2} \tag{2}$$

contempla que el momento en la dirección perpendicular a los planos de la cavidad se cuantiza, siendo m un entero. El vector de onda **k** denota entonces el vector en el plano. En este caso  $\hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  denota el operador de creación que crea un fotón con energía  $\omega_{\mathbf{k}}$ . La dispersión fotónica  $\omega_{\mathbf{k}} = c\sqrt{k^2 + \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2}$  para el primer modo de la cavidad puede ser aproximado como

$$\omega_{\mathbf{k}} \approx \omega_c + \frac{k^2}{2m_c},\tag{3}$$

donde  $\omega_c = \frac{2\pi c}{L}$  es la energía del modo de la cavidad para  $\mathbf{k} = 0$ , mientras la dispersión del fotón adquiere una forma cuadrática donde la masa del fotón es  $m_c = \omega_c/c^2$ .

Para entender el acoplamiento colectivo de las N moléculas al campo electromagnético es conveniente introducir un operador colectivo definido como

$$\hat{x}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i} \hat{\sigma}_{i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{i}},\tag{4}$$

en práctica, las moléculas se encuentran desordenadas, sin embargo, por claridad en los cálculos, asumiremos que los moléculas estan acomodadas en un arreglo periódico en dos dimensionales.

El Hamiltononiano de luz-materia escrito en términos de este nuevo operador esta dado

$$\hat{H}_{l-m} = \sqrt{N}g \sum_{\mathbf{k}} (\hat{x}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{x}_{\mathbf{k}}).$$
(5)

Interesantemente, uno puede mostrar que las reglas de conmutación para las excitaciones colectivas obedecen

$$[\hat{x}_{\mathbf{k}}, \hat{x}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left( 1 - \mathcal{O}\left(\frac{n_e}{N}\right) \right), \tag{6}$$

mientras  $n_e$ , el número de moléculas excitadas sea pequeño, esto es,  $n_e/N \ll 1$  las reglas de conmutación del operador colectivo son efectivamente bosónicas. A este nuevo campo, le denominaremos **excitón**, y asumiremos que para todo fin práctico es un bosón.

**Excitones-polaritones.** En términos de los operadores bosónicos del fotón y excitón el Hamiltoniano toma una forma matricial

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} & x_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_{\mathbf{k}} & \Omega/2\\ \Omega/2 & \epsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{a}_{\mathbf{k}} \\ \hat{x}_{\mathbf{k}} \end{bmatrix},\tag{7}$$

donde  $g\sqrt{N} = \Omega/2$  y hemos asumido que  $\epsilon_i = \epsilon$  es independiente de la posición. Dicha matriz que puede ser facilmente diagonalizada, y cuyos eigenvalores corresponden a las energías del sistema

$$\omega_{\mathbf{k}}^{LP/UP} = \frac{1}{2} \left( \epsilon + \omega_{\mathbf{k}} \pm \sqrt{(\epsilon - \omega_{\mathbf{k}})^2 + \Omega^2} \right).$$
(8)

Las dos soluciones corresponden a estados híbridos de luz-materia, es decir, los eigenvectores de la matriz Hamiltoniana son parte materia-parte luz, y se conocen como excitones-polaritones.

Los excitones-polaritones se definen como los operadores en los cuales el Hamiltoniano en Ec. 7 se ve diagonal, esto es, existe una transformación unitaria

$$\hat{V}_{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} \cos \theta_{\mathbf{k}} & \sin \theta_{\mathbf{k}} \\ -\sin \theta_{\mathbf{k}} & \cos \theta_{\mathbf{k}} \end{bmatrix},\tag{9}$$

tal que la matrix Hamiltoniana es diagonal bajo esta transformación, es decir,

$$\hat{V}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \begin{bmatrix} \omega_{\mathbf{k}} & \Omega/2\\ \Omega/2 & \epsilon \end{bmatrix} \hat{V}_{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} \omega_{\mathbf{k}}^{LP} & 0\\ 0 & \omega_{\mathbf{k}}^{UP} \end{bmatrix}.$$
(10)

El Hamiltoniano puede ser escrito en términos de unos nuevos operadores,  $\hat{L}_{\mathbf{k}}$  y  $\hat{U}_{\mathbf{k}}$ 

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}}^{LP} \hat{L}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{L}_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}^{UP} \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{U}_{\mathbf{k}}, \tag{11}$$

donde los operadores de polaritón crean excitaciones fundamentales del sistema que son excitaciones híbridas de luz-materia,

$$\hat{L}_{\mathbf{k}} = \cos\theta_{\mathbf{k}}\hat{x}_{\mathbf{k}} + \sin\theta_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}},\tag{12}$$

$$\hat{U}_{\mathbf{k}} = -\sin\theta_{\mathbf{k}}\hat{x}_{\mathbf{k}} + \cos\theta_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}},\tag{13}$$

esto muestra que el grado de híbridización de la luz con la materia esta dado por los coeficientes de la transformación, llamados coeficientes de Hopfield [22]. Matemáticamente los coeficientes de Hopfield estan dados por

$$\cos^2 \theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{(\epsilon - \omega_{\mathbf{k}})}{\sqrt{(\epsilon - \omega_{\mathbf{k}})^2 + \Omega^2}} \right),\tag{14}$$

la transformación al ser unitaria impone  $\cos^2 \theta_{\mathbf{k}} + \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} = 1$ .

El acoplamiento fuerte de luz-materia se da cuando las energías de los excitones y de la luz son del mismo orden 56 de magnitud. Por claridad, ejemplifiquemos la formación de los excitones para  $\epsilon = \omega_c = 2.3$  eV,  $\Omega = 0.31$  eV, y  $\omega_{\mathbf{k}} = \sqrt{(ck)^2 + \omega_c}$  con  $k = \omega/c \sin \psi$  siendo  $\psi$  el ángulo de incidencia del campo electromagnético. En ausencia

de acoplamiento luz-materia la dispersión de los excitones es una constante, independiente del vector de onda  $\mathbf{k}$ , mientras que la dispersión de los fotones es una parábola como se muestra en 2 (izquierda) donde las líneas verdes punteadas/continuas corresponden a los excitones/fotones en ausencia de acoplamiento luz-materia.

El acoplamiento luz-materia da lugar a la formación de los estados polaritónicos , estos estados exhiben un *cruce evitado*, es decir, el punto de contacto del excitón y fotón desaparece y las energías polaritónicas nunca se cruzan. Por otro lado, la componente de materia y luz que forma los polaritones es máxima en  $\psi = 0$  y corresponde al punto en el cual el polaritón es mitad fotón y mitad materia como se muestra en Fig. 2 (derecha) donde se grafican los coeficientes de Hopfield como función del ángulo  $\psi$ .



FIG. 2: (Izquierda) Ramas polaritónicas en rojo y negro. (Derecha) Coeficientes de Hopfield como función del ángulo de incidencia  $\psi$ .

La figura 2 illustra la naturaleza híbrida de los polaritones, por ejemplo, en contraste con los excitones que carecen de energía cinética, ambas ramas polaritónicas muestran una dispersión no trivial, al fondo de la banda dicha dispersión es cuadrática  $k^2/2m_{LP}$  caracterizada por una masa  $m_{LP} \sim m_c$ , la cual es órdenes de magnitud mucho más pequeña que la masa de los electrones o los átomos en un gas. Por otra parte, a través de sus componentes excitónica, los polaritones pueden interactuar entre sí, imprimiendo una respuesta óptica no-lineal ausente sin la hibridización.

#### III. CONDENSACIÓN DE BOSE-EINSTEIN DE POLARITONES DE FRENKEL

Antes de entrar en la descripción de la condensación de Bose-Einstein de polaritones hagámos un breve repaso de conceptos fundamentales de la condensación ideal de Bose-Einstein.

Condensación ideal de Bose-Einstein. La condensación ideal de Bose-Einstein se refiere a la población macroscópica del estado base en un sistema bosónico.

Consideremos un sistema formado por N partículas bosónicas indistinguibles. El número de partículas totales se puede separar en aquellas que ocupan el estado base  $N_0$  y aquellas que se encuentran en estados excitados, que denotaremos por  $N_{ex}$ , distribuidas de forma tal que

$$N = N_0 + N_{ex}.\tag{15}$$

La estadística de Bose-Einstein determina el número de partículas que ocupa cada nivel de energía

$$n(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{e^{(\epsilon_{\mathbf{k}}-\mu)/k_B T} - 1},\tag{16}$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzman, T la temperatura,  $\mu$  el potencial químico y  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  la dispersión en energía. Dicha fórmula impone que  $\mu < min_{\mathbf{k}}(\epsilon(\mathbf{k}))$ , para el caso en el cual  $\epsilon(\mathbf{k}) = k^2/2m$  el potencial químico esta acotado a valores negativos  $\mu < 0$ .

El número de partículas en los estados excitados puede ser calculado simplemente integrando sobre cada uno de los números de ocupación

$$N_{ex} = V^{(d)} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{e^{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/k_B T} - 1},$$
(17)

donde d denota la dimensionalidad del sistema. Asumiendo un confinamiento en una caja d-dimensional de paredes impenetrables. Para un experimento a temperatura constante T = fijo, la condición para la existencia de la condensación de Bose-Einstein es que la integral en  $N_{ex}(\mu \to 0)$  sea finita.

Revisemos brevemente el fenómeno de condensación para un sistema en tres dimensiones, con partículas bosónicas de masa m. Consideremos un experimento a temperatura finita y fija en el cual se añaden partículas al sistema de forma tal que el número de partículas totales N se incrementa. En Fig. 3 se muestra la densidad  $N_{ex}/V$  como función del potencial químico a temperatura constante, para un número arbitrariamente pequeño de partículas es posible encontrar un valor del potencial químico lo suficientemente negativo que satisfaga  $N_{ex} = N$ . Al incrementar el número de partículas el potencial químico se incrementa para satisfacer  $N_{ex} = N$ . Sin embargo, existe un valor  $N_{ex}^{cr}$  que la integral en ec. 17 puede tomar, y es el valor que toma cuando  $\mu = 0$ 

$$n_{ex}^{cr}(\mu=0) = \frac{N_{ex}^{cr}(\mu=0)}{V} = \zeta(3/2) \left(\frac{mk_B T}{2\pi}\right)^{3/2},\tag{18}$$

donde  $\zeta$  es la función zeta de Riemann. Al ser este un número finito, si se añaden N partículas al sistema tal que  $N > N_{ex}^{cr}$  entonces, hay un faltante de partículas  $N - N_{ex}$  que necesariamente poblan al estado base, siendo la fracción  $N_0/V$  un número distinto de cero en el límite termodinámico. La población macroscópica del estado base marca la entrada del fenómeno de la condensación de Bose-Einstein.



FIG. 3: Fenómeno de condensación de Bose-Einstein en 3D. A temperatura fija e incrementar el potencial químico el número de partículas en los estados excitados aumenta monótonamente pero satura en  $\mu = 0$ , el valor máximo que el potencial químico puede tomar. Al seguir incrementando el número de partículas, estas ocupan necesariamente el estado base, poblandolo macroscopicamente.

Interesantemente, la densidad crítica  $n_{ex}^{cr} = n_{ex}(\mu = 0) \propto m^{3/2}$  es decir, para partículas livianas el fenómeno de condensación ocurre a densidades más bajas que para partículas pesadas. La naturaleza hiperliviana de los polaritones cuya masa es 4-5 órdenes de magnitud más pequeña que la masa de los electrones permiten suponer que el fenómeno de condensación de polaritones se puede realizar a temperatura ambiente.

Condensación de Bose-Einstein de polaritones de Frenkel. Para un sistema bidimensional no interactuante con partículas con dispersión cuadrática  $\epsilon_k = k^2/2m$  confinadas a una caja de paredes impenetrables el fenómeno de condensación de Bose-Einstein es inalcanzable a temperatura distinta de cero, esto es  $n^{cr}(\mu = 0) = \infty$ .

En práctica, los sistemas son interactuantes y es necesario extender el concepto de condensado de Bose-Einstein para incluir los efectos de las interacciones. En dos dimensiones, el equivalente de la condensación de Bose-Einstein es el fenómeno de superfluidez tipo Berezhinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) [23], el cual va más allá del objetivo de las notas. En estas notas nos enfocaremos en el estudio de teorías efectivas para describir la física de muchos cuerpos 58 a bajas energías, en particular, le daremos enfásis al estudio de la rama inferior polaritónica (lower-polaritons).

Consideremos entonces el Hamiltoniano

$$\hat{H}_{LP} = \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}}^{LP} - \mu) \hat{L}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{L}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2\mathcal{A}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} U_{LP}(\mathbf{q}) \hat{L}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{L}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{L}_{\mathbf{k}'} \hat{L}_{\mathbf{k}}, \tag{19}$$

dicho Hamiltoniano contempla solo operadores que involucran al polaritón inferior y asume que la energía de interacción  $U_{LP}(\mathbf{q})$  es mucho menor que la separación entre las ramas polaritónicas  $(U_{LP}(\mathbf{q}) \ll \Omega)$ , y  $\mu$  el potencial químico de los polaritones, que en este caso fijaremos al mínimo de la banda polaritónica  $\mu = \omega_{\mathbf{k}=0}^{LP}$ .

Supongamos que los polaritones inferiores forman un condensado de Bose-Einstein (cuyas características describiremos ahora) caracterizado por la población macroscópica del estado con momento  $\mathbf{k} = 0$  de manera que

$$\hat{L}_{\mathbf{k}=0}^{\dagger}|\text{BEC}\rangle \approx \sqrt{N_0}|\text{BEC}\rangle, \tag{20}$$
$$\hat{L}_{\mathbf{k}=0}|\text{BEC}\rangle \approx \sqrt{N_0}|\text{BEC}\rangle,$$

es decir, añadir o remover una partícula con momento  $\mathbf{k} = 0$  del estado  $|\text{BEC}\rangle$  deja al sistema *intacto* pues  $N_0 \gg 1$ , es un número macroscópico tal que  $N_0 + 1 \sim N_0 \sim N_0 - 1$ . Entonces, degradaremos sólo al operador polariton inferior con momento  $\mathbf{k} = 0$  a un número  $\hat{L}_{\mathbf{k}=0}^{\dagger} \approx \hat{L}_{\mathbf{k}=0} \approx \sqrt{N_0}$ . Esta aproximación permite reducir el Hamiltoniano a una forma cuadrática

$$\hat{H}_{LP} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}}^{LP} - \mu + n_0 U_{LP}(\mathbf{0})) \hat{L}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{L}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} \frac{N_0 U_{LP}(\mathbf{q})}{2A} \left( \hat{L}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{L}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \hat{L}_{\mathbf{k}} \hat{L}_{-\mathbf{k}} \right),$$
(21)

es posible expresar a dicho Hamiltoniano como un sistema ideal de la forma

$$H_B = \epsilon_0 + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}}$$
<sup>(22)</sup>

a través de la siguiente transformación, conocida como transformación de Bogoliubov [2]

$$\hat{L}_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{\mathbf{k}} + v_{-\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{-\mathbf{k}}^{\dagger}$$

$$\hat{L}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} = u_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{-\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{-\mathbf{k}},$$
(23)

donde  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$  son los parámetros de la transformación que pueden ser determinados por la forma de la ecuación 22 junto con la suposición de que los operadores  $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}}$  obedecen las mismas reglas bosónicas de conmutación que los polaritones orignales, es decir,

$$[\hat{\gamma}_{\mathbf{k}}, \hat{\gamma}^{\dagger}_{\mathbf{k}'}] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'},\tag{24}$$

que restringe

$$u_{\bf k}^2 - v_{\bf k}^2 = 1. (25)$$

Después de un álgebra (un poco laboriosa) es posible mostrar que los coeficientes de dicha transformación son

$$u_{\mathbf{k}} = \left(\frac{\omega_{\mathbf{k}}^{LP} + n_0 U_{LP}(\mathbf{k})}{2E_{\mathbf{k}}} + 1\right)^{1/2},\tag{26}$$

donde

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\omega_{\mathbf{k}}^{LP} \left( \omega_{\mathbf{k}}^{LP} + 2n_0 U_{LP}(\mathbf{k}) \right) \right)},$$
(27)

interesantemente, para momentos pequeños ( $\omega_{\mathbf{k}}^{LP} \ll n_0 U_{LP}(\mathbf{k})$  la dispersión de los polaritones toma una forma sencilla

$$E(\mathbf{k}) \approx c_s k,\tag{28}$$

 $\operatorname{donde}$ 

$$c_s = \sqrt{\frac{n_0 U_{LP}(\mathbf{0})}{m_{LP}}},\tag{29}$$

tiene unidades de velocidad y corresponde a la velocidad del sonido del fluido [24].

Superfluidez de polaritones. El cambio en la dispersión del condensado de Bose-Einstein de polaritones va acompañado del fenómeno de superfluidez, el cual describiremos a continuación.

Un gas al fluir en general disipa energía, la disipación esta asociada a que al desplazarse se crean excitaciones elementales, que en turno *calientan* al sistema, la creación de estas excitaciones elementales por conservación de energía conlleva una reducción en la energía cinética del fluido, que efectivamente se traduce en fricción (se frena el fluido). Superfluidez se define como la habilidad de un fluido de *fluir* sin fricción, es decir, de desplazarse sin crear excitaciones elementales.

Para mostrar que un condensado de Bose-Einstein de polaritones es superfluido consideremos que el condensado de polaritones se encuentra constreñido en un cilindro y que hay un flujo de polaritones que se mueven con velocidad  $\mathbf{v}$ , en la dirección del eje del cilindro. En el marco de referencia del fluido, el fluido claramente esta estático, y las excitaciones elementales en este marco de referencia simplemente son

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{fluido} = E(\mathbf{k}).$$

En el marco de referencia del laboratorio, después de una transformación de Galileo la energía de dicha excitación es

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^{lab} = E(\mathbf{k}) - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}. \tag{30}$$

Ahora bien, un sistema puede crear excitaciones elementales de forma espontánea sólo si es favorable energéticamente, esto es, si  $\epsilon_{\mathbf{k}}^{lab} < 0$  para algún valor de **k**. Dado que  $\epsilon_{\mathbf{k}}^{lab}$  se minimiza cuando **k** y **v** son paralelos, la condición que dictamina si un fluido genera fricción es la existencia de algún valor de k que satisfaga

$$\frac{E(k)}{k} < v, \tag{31}$$

de forma tal que crear una excitación es favorable para el sistema. En nuestro caso  $E(k) \approx c_s k$  por tanto el llamado criterio de Landau impone

$$c_s < v, \tag{32}$$

esto implica que para velocidades menores a  $c_s$  el sistema es incapaz de crear excitaciones elementales de forma espontánea y por ende se propaga sin disipación, es decir, **superfluye**.

Hemos demostrado entonces que un gas débilimente interactuante de excitones-polaritones forma un condensado de Bose-Einstein descrito por la teoría de Bogoliubov. El condensado de Bose-Einstein polaritónico es un superfluido cuya velocidad crítica esta dada por el criterio de Landau.

**Ecuación de Gross-Pitaevskii para polaritones.** Hasta el momento hemos ignorado un aspecto clave de los excitones-polaritones: su carácter disipativo. Es decir, debido a imperfecciones de la cavidad y a procesos complicados como decaimiento no radiativo de los excitones, el sistema pierde polaritones y es incapaz de sostener un estado de equilibrio termodinámico. Sin embargo, es posible crear un *estado estacionario* resultado de un balance entre un flujo de polaritones que se injectan a la cavidad y las pérdidas de polaritones.

El flujo de fotones puede ser introducido a través de un haz láser que ilumine coherentemente la cavidad. Este proceso es modelado por el Hamiltoniano

$$\hat{H}_{\text{drive}} = \sum_{\mathbf{k}} (I_p \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}} e^{-i\omega_p t} + I_p^* \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\omega_p t}), \tag{33}$$

donde  $I_p$  es la intensidad del haz de bombeo y  $\omega_p$  la frecuencia del láser.

Para describir la dinámica del condensado de Bose-Einstein es conveniente introducir la función de onda del condensado  $\psi(\mathbf{r})$  la cual obedece la ecuación extendida de Gross-Pitaevskii (eGP) [7]

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\omega_{LP} - \omega_p + \frac{p^2}{2m_{LP}} + V(r) + U_{LP}|\psi|^2 - i\gamma_{LP}\right]\psi + I_{LP},\tag{34}$$

donde las pérdidas del sistema estan descritas por el primer término de la segunda línea, en este caso la tasa de pérdidas de polaritones fugandose de la cavidad es  $\gamma_{LP}$ , físicamente, corresponde a que un polariton permanece en la cavidad por un tiempo  $\tau_{LP} \sim 1/\gamma_{LP}$ . Notemos que en este caso, la energía del haz de bombeo *hace* del potencial químico. La ecuación extendida de Gross-Pitaevskii es una ecuación de *Schrödinger efectiva* en la cual los efectos de interacción se introducen a través del término no-lineal  $U_{LP}|\psi|^2$ .

60

El carácter disipativo del sistema impide la formación de un estado en equilibrio termodinámico, sin embargo, el sistema si puede alcanzar un estado estacionario, el cual por definición obedece

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = 0. \tag{35}$$

Para un sistema confinado en una caja y despreciando el término de energía cinética, la ecuación extendida de Gross-Pitaevskii adquiere una forma simple,

$$0 = \left[\omega_{LP} - \omega_p + U_{LP}|\psi|^2 - i\gamma_{LP}\right]\psi + I_{LP},\tag{36}$$

cuyas soluciones se ilustran en Fig. 4. La ecuación de Gross-Pitaevskii para polaritones en general acepta más de una solución para algún valor de la intensidad del haz de bombeo  $I_{LP}$ , es decir, multiples densidades del condensado permiten la formación de un estado estacionario. En la figura 4 se muestran los estados estacionarios de la ecuación de Gross-Pitaevskii para polaritones, la zona sombreada muestra la región de multi-estabilidad. En realidad, no todas



FIG. 4: Soluciones a la ecuación de Gross-Pitaevskii para polaritones. La rama inferior y la rama de histeresis transitan en la dirección indicada por las flechas negras.

las soluciones son físicas, las dos ramas superiores e inferiores se deben de recorrer de forma continua y solo se puede brincar de una rama a otra cuando se alcanzan los extremos de las ramas, indicados por los puntos azules y negros respectivamente. Por tanto, la rama intermedia es innacesible físicamente. La rama superior es conocida como rama de histeresis pues sostiene valores de alta densidad bosónica para intensidades  $I_{LP}$  más pequeñas en comparación con la rama inferior.

Láseres y formación del condensado de Bose-Einstein. La condensación de Bose-Einstein fuera de equilibrio termodinámico de excitones-polaritones experimentalmente se realiza a través de un proceso dinámico en el cual excitones son introducidos *fuera de resonancia* y a través de las interacciones el sistema relaja a un estado estacionario. Dicho proceso se ilustra en la figura 5, un haz de bombeo crea excitones-polaritones *fuera de resonancia*, en la región marcada en rojo, en dicha región los excitones-polaritones son predominantemente excitones. A través de las interacciones los excitones son re-convertidos a excitones-polaritones (región azul) y pueden favorecer el estado de condensado de Bose-Einstein.

La dinámica del sistema esta dada por

$$\frac{dn_X(t)}{dt} = I_X - \gamma_X n_X(t) - W n_X(t) |\psi(t)|^2$$
(37)

$$i\frac{d\psi(t)}{dt} = \left(\omega_{LP} + g|\psi(t)|^2 + gn_X(t) + i[Wn_X(t) - \gamma_{LP}]\right)\psi(t),$$
(38)

la primera ecuación para  $n_X(t)$  no es sino una ecuación cinética para la población de excitones fuera de resonancia que se inyectan a una razón  $I_X$ , se fugan a una taza  $\gamma_X$  y se reconvierten al condensado gracias a las interacciones 61 W. Por otra parte, la segunda ecuación corresponde a la ecuación extendida de Gross-Pitaevskii.



FIG. 5: Dinámica del condensado de Bose-Einstein de excitones-polaritones. Un haz de luz bombea excitones-polaritones fuera de resonancia a una energía y momento lejos del estado base. Las interacciones entre los excitones saturan la población de dicho estado excitado y promueven la ocupación macroscópica del modo polaritónico con  $\mathbf{k} = 0$ .

Buscamos soluciones al estado estacionario de la forma  $n_X(t) = n_X y \psi(t) = e^{i\omega_{cl}}\psi_0$ . De las ecuaciones cinéticas se tiene que  $(n_X = I_X/\gamma_X, \psi_0 = 0)$ , es siempre solución, dicho estado estacionario esta caracterizado por una población del estado base nulo. Dicha solución es única para intensidades de bombeo  $I_X < \gamma_X \gamma_{LP}/W$ .

del estado base nulo. Dicha solución es única para intensidades de bombeo  $I_X < \gamma_X \gamma_{LP}/W$ . Al incrementar la intensidad del haz de bombeo  $I_X$  y en particular cuando  $I_X^{th} = \gamma_X \gamma_{LP}/W$ , el sistema es incapaz de seguir populando el estado excitónico  $n_X$  y al seguir agregando excitones al sistema, estos se relajan al estado base, donde

$$|\psi_0|^2 = \frac{I_X - I_X^{th}}{\gamma_{LP}}, I_X > I_X^{th}$$
(39)

es decir, el sistema condensa para  $I_X > I_X^{th}$ . Por otro lado, la energía del polaritón es

$$\omega_{cl} = \omega_{LP} + g|\psi_0|^2 + gn_X,\tag{40}$$

mientras la población del estado excitónico es en el estado estacionario

$$n_X = \frac{I_X}{\gamma_X + W |\psi_0|^2},$$
(41)

este proceso de condensación de Bose-Einstein *fuera de equilibrio* es similar al procedimiento en equilibrio termodinámico descrito previamente, en el cual, la condensación de Bose-Einstein ocurre al saturar el valor máximo de partículas que pueden poblar el estado excitado. En este caso, se satura el número máximo de excitones-polaritones que pueden ocupar el estado bombeado *fuera de resonancia*.

#### IV. CONCLUSIONES

En estas notas hemos revisado el concepto de excitón-polaritón de Frenkel el cual resulta del acoplamiento fuerte de un modo colectivo de materia conocido como excitón a fotones de cavidad. Resultado de dicho acoplamiento surge una *quasipartícula* híbrida de luz-materia que se conoce como el excitón-polaritón, o en breve, polaritón. El polaritón es una partícula que posee simultáneamente propiedades tanto de la luz como de la materia, por un lado, hereda la coherencia y la masa ultra-liviana de los fotones de cavidad, mientras que retiene la capacidad de interactuar de su componente de materia.

Los polaritones pueden ser descritos a través de la teoría inicialmente desarrollada por Hopfield, la cual permite escribir al sistema en término de sus valores propios, los cuales determinan la formación de dos ramas polaritónicas: el polaritón superior y el polaritón inferior. Estos estados estan determinados por su energía y por su grado de hibridización de luz y materia. Contrario a la dispersión de los excitones y fotones de cavidad, los estados polaritónicos se repelen y sus energías exhiben un cruce evitado. La dispersión de ambas ramas polaritónicas exhibe una curvatura

62

parabólica a momentos pequeños reflejo de su componente fotónica. El grado de hibridización de los polaritónicas esta por su parte determinado por los coeficientes de Hopfield.

La masa ultra-liviana de los polaritones combinada con las interacciones entre polaritones permite la formación de estados cuánticos de muchos cuerpos típicamente asociados a la materia. En estas notas revisamos el fenómeno de condensación de Bose-Einstein de polaritones dentro del marco de la teoría de Bogoliubov, demostramos que un condensado de Bose-Einstein polaritónico exhibe una dispersión *fonónica* a bajas energías, dispersión caracterizada por la velocidad del sonido del medio, la cual determina la velocidad máxima a la cual un fluido cuántico de luz puede desplazarse sin disipar, esto es, superfluir.

Finalmente, revisamos la ecuación de Gross-Pitaevskii para describir la parte disipativa y de bombeo intrínseca a los polaritones, mostramos la emergencia de una bi-estabilidad polaritónica y estudiamos la formación espontánea del condensado de Bose-Einstein de polaritones cuando los polaritones son bombeados fuera de resonacia.

Los excitones-polaritones son quasi-partículas híbridas de luz-materia que surgen del acoplamiento de excitaciones colectivas de la materia con fotones. Además de sus propiedades fundamentales que los hacen intrínsicamente interesantes para la realización tanto de estados de polaritones individuales como de fases cuánticas exóticas de muchos cuerpos [25], los polaritones son una herramienta prometedora para aplicaciones en láseres [26], simulación cuántica [27], interferometría [28], metrología [29], cómputo clásico y cómputo clásico [30].

Agradecimientos.- Estas notas fueron financiadas parcialmente por el proyecto DGAPA (UNAM) No. IN108620. Se agradece discusiones con Hugo Lara y Guiseppe Pirruccio así como Benjamín Mondragón por la revisión, comentarios y correción de las notas.

- [1] A.Einstein, Königliche Preußische Akademie der Wissenschaften (1924), URL https://www.uni-muenster.de/imperia/ md/content/physik\_ap/demokritov/mbecfornonphysicists/einstein\_1924\_1925.pdf.
- [2] C. Pethick and H. Smith, Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases (2nd ed.) (Cambridge University Press, 2008), ISBN 9780521846516.
- [3] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, Phys. Rev. Lett. 83, 2498 (1999), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.83.2498.
- M. Tsubota, Contemporary Physics 50, 463 (2009), https://doi.org/10.1080/00107510902811959, URL https://doi.org/ 10.1080/00107510902811959.
- [5] I. Carusotto, S. X. Hu, L. A. Collins, and A. Smerzi, Phys. Rev. Lett. 97, 260403 (2006), URL https://link.aps.org/ doi/10.1103/PhysRevLett.97.260403.
- [6] T. Byrnes, G. V. Kolmakov, R. Y. Kezerashvili, and Y. Yamamoto, Phys. Rev. B 90, 125314 (2014), URL https: //link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.125314.
- [7] I. Carusotto and C. Ciuti, Rev. Mod. Phys. 85, 299 (2013), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.85.
   299.
- [8] G. L. Rocca, in *Electronic Excitations in Organic Nanostructures* (Academic Press, 2003), vol. 31 of *Thin Films and Nanostructures*, pp. 97-128, URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1079405003310026.
- [9] J. Kasprzak, M. Richard, S. Kundermann, A. Baas, P. Jeambrun, J. M. J. Keeling, F. M. Marchetti, M. H. Szymańska, R. André, J. L. Staehli, et al., Nature 443, 409 (2006), ISSN 1476-4687, URL https://doi.org/10.1038/nature05131.
- [10] A. Amo, J. Lefrère, S. Pigeon, C. Adrados, C. Ciuti, I. Carusotto, R. Houdré, E. Giacobino, and A. Bramati, Nature Physics 5, 805 EP (2009), URL https://doi.org/10.1038/nphys1364.
- [11] N. Takemura, S. Trebaol, M. Wouters, M. T. Portella-Oberli, and B. Deveaud, Nature Physics 10, 500 (2014), ISSN 1745-2481, URL https://doi.org/10.1038/nphys2999.
- [12] J. Bloch, I. Carusotto, and M. Wouters, Nature Reviews Physics 4, 470 (2022), URL https://doi.org/10.1038/ s42254-022-00464-0.
- [13] M. Combescot and S.-Y. Shiau, Excitons and Cooper Pairs. Two Composite Bosons in Many-Body Physics, Oxford Graduate Texts (Oxford University Press, 2016).
- [14] M. Knupfer, Applied Physics A 77, 623 (2003), URL https://doi.org/10.1007/s00339-003-2182-9.
- [15] J. Keeling and S. Kéna-Cohen, Annual Review of Physical Chemistry 71, 435 (2020), pMID: 32126177, https://doi.org/10.1146/annurev-physchem-010920-102509, URL https://doi.org/10.1146/ annurev-physchem-010920-102509.
- [16] J. D. Plumhof, T. Stöferle, L. Mai, U. Scherf, and R. F. Mahrt, Nature Materials 13, 247 (2014), URL https://doi.org/ 10.1038/nmat3825.
- [17] G. Lerario, A. Fieramosca, F. Barachati, D. Ballarini, K. S. Daskalakis, L. Dominici, M. De Giorgi, S. A. Maier, G. Gigli, S. Kéna-Cohen, et al., Nature Physics 13, 837 (2017), URL https://doi.org/10.1038/nphys4147.
- [18] J.-W. Kang, B. Song, W. Liu, S.-J. Park, R. Agarwal, and C.-H. Cho, Science Advances 5, eaau9338 (2019), https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/sciadv.aau9338, URL https://www.science.org/doi/abs/10.1126/sciadv. aau9338.
- [19] B. Xiang, R. F. Ribeiro, Y. Li, A. D. Dunkelberger, B. B. Simpkins, J. Yuen-Zhou, and W. Xiong, Science Advances 5, eaax5196 (2019), https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/sciadv.aax5196, URL https://www.science.org/doi/abs/

10.1126/sciadv.aax5196.

- [20] M. Litinskaya, P. Reineker, and V. Agranovich, Journal of Luminescence 119-120, 277 (2006), ISSN 0022-2313, dynamical Processes in Excited States of Solids, URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022231306000056.
- [21] M. Sánchez-Barquilla, A. I. Fernández-Domínguez, J. Feist, and F. J. García-Vidal, ACS Photonics 9, 1830 (2022), URL https://doi.org/10.1021/acsphotonics.2c00048.
- [22] J. J. Hopfield, Phys. Rev. 112, 1555 (1958), URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.112.1555.
- [23] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, Journal of Physics C: Solid State Physics 6, 1181 (1973), URL https://doi.org/10. 1088/0022-3719/6/7/010.
- [24] G. Mahan, Many-Particle Physics (Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000).
- [25] F. I. Moxley, E. O. Ilo-Okeke, S. Mudaliar, and T. Byrnes, Emergent Materials 4, 971 (2021), URL https://doi.org/10. 1007/s42247-021-00200-x.
- [26] H. Deng, G. Weihs, D. Snoke, J. Bloch, and Y. Yamamoto, Proceedings of the National Academy of Sciences 100, 15318 (2003), https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.2634328100, URL https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas. 2634328100.
- [27] I. Buluta and F. Nori, Science 326, 108 (2009), https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.1177838, URL https: //www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1177838.
- [28] D. Nigro, V. D'Ambrosio, D. Sanvitto, and D. Gerace, Communications Physics 5, 34 (2022), URL https://doi.org/10. 1038/s42005-022-00810-9.
- [29] P. Adhikary, S. Mondal, A. W. Laskar, and S. Ghosh, in Conference on Lasers and Electro-Optics (Optica Publishing Group, 2021), p. FM4M.6, URL http://opg.optica.org/abstract.cfm?URI=CLE0\_QELS-2021-FM4M.6.
- [30] A. Kavokin, T. C. H. Liew, C. Schneider, P. G. Lagoudakis, S. Klembt, and S. Hoefling, Nature Reviews Physics 4, 435 (2022), URL https://doi.org/10.1038/s42254-022-00447-1.
- [31] A. Fetter and J. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, Dover Books on Physics Series (Dover Publications, 1971), ISBN 9780486428277.

#### Appendix A: Segunda cuantización

Revisemos ahora muy brevemente el formalismo de segunda cuantización en mecánica cuántica, el cual es el más apropiado para describir sistemas de muchos cuerpos. Dicho formalismo es generalmente objeto de estudio de un curso avanzado de licenciatura o de maestría, en estas notas no seremos tan ambiciosos y nos limitaremos a delinear aspectos muy generales de la segunda cuantización. Segunda cuantización se puede estudiar en libros clásicos de Teoría de Muchos Cuerpos [31].

Iniciemos considerando una sola partícula en un potencial confinante de forma que el Hamiltoniano que gobierna a la partícula esta dado por

$$\hat{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}),\tag{A1}$$

donde *m* es la masa de la partícula,  $V(\mathbf{r})$  el potencial que confina a la partícula. Supongamos que conocemos el conjunto de eigenfunciones y eigenvalores del sistema, es decir, tenemos el conjunto de  $\{E_m, \phi_m(\mathbf{r})\}$  tal que

$$H_0\phi_m(\mathbf{r}) = E_m\phi_m(\mathbf{r}),\tag{A2}$$

donde m es un número entero que enumera los estados cuánticos. Notemos, que la etiqueta m identifica al estado cuántico de forma única. Ahora consideremos N partículas, que no interactúan entre sí sujetas al mismo Hamiltoniano,

$$\hat{H}_{0}^{(N)} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_{i}^{2}}{2m} + V(\mathbf{r}_{i}), \tag{A3}$$

64

es decir, tenemos N réplicas del sistema, donde los operadores  $\mathbf{p}_i \ge V(\mathbf{r}_i)$  son operadores de partícula individual donde el índice *i* etiqueta a una de las N partículas. Para describir al sistema.

Para sistemas bosónicos, las eigenfunciones deben ser simétricas ante el intercambio de dos partículas, es decir, cualquiera que sea la función de onda de N partículas satisface

$$\psi_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_i, \dots \mathbf{r}_j, \dots \mathbf{r}_N) = +\psi_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots \mathbf{r}_j, \dots \mathbf{r}_i, \dots \mathbf{r}_N), \tag{A4}$$

dado que conocemos las eigenfunciones de partícula individual  $\phi_m(\mathbf{r})$  es natural expresar a las soluciones  $\psi_N$  (que no hemos encontrado!) en términos de una combinación lineal simetrizada de estas primeras.

Supongamos que tenemos un estado en el cual hay  $N_0$  partículas en el estado m = 0, hay  $N_1$  en el estado m = 1,... $N_l$  particulas en el estado m = l y construimos la función de onda sin simetrizar como

$$\psi_N = \phi_0(\mathbf{r}_1)\phi_0(\mathbf{r}_2)...\phi_0(\mathbf{r}_{N_0})\phi_1(\mathbf{r}_{N_0+1})...\phi_1(\mathbf{r}_{N_0+N_1})...\phi_{l_{max}}(\mathbf{r}_N)),\tag{A5}$$

donde  $l_{max}$  es el estado de energía más alto ocupado por alguna partícula. Es fácil mostrar que

$$\hat{H}_0^{(N)}\psi_N = (N_0 E_0 + N_1 E_1 + \dots E_{l_{max}} N_{l_{max}})\psi_N,\tag{A6}$$

es decir, es eigenestado. Sin embargo no es una solución aceptable de la mecánica cuántica para bosones pues no esta simetrizada. La simetrización de la función de onda es

$$\phi_N^B(\mathbf{R}) = \sqrt{\frac{N_0! N_1! \dots N_{l_{max}}!}{N!}} \sum_{\text{permutaciones}} \phi_0(\mathbf{r}_1) \phi_0(\mathbf{r}_2) \dots \phi_0(\mathbf{r}_{N_0}) \phi_1(\mathbf{r}_{N_0+1}) \dots \phi_1(\mathbf{r}_{N_0+N_1}) \dots \phi_{l_{max}}(\mathbf{r}_N))$$
(A7)

donde  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ... \mathbf{r}_N)$ . Los sistemas físicos de interés generalmente involucran  $N \sim 10^4 - 10^{23}$  por lo cual se ve complicado operar con expresiones de este tipo.

El corazón de la segunda cuantización está en la siguiente observación: Para describir a un estado cuántico de muchos cuerpos no es requisito conocer la función de onda del sistema. Basta conocer la ocupación de los estados m, para construir un estado de la forma

$$|N_0, N_1, \dots N_l, \dots\rangle, \tag{A8}$$

el cual denota efectivamente que  $N_0$  partículas poblan el estado base,  $N_1$  el primer excitado,... y que por construcción corresponde en la representación de coordenadas a la función de onda

$$\phi_N^B(\mathbf{R}) = \langle \mathbf{R} | N_0, N_1, \dots N_l, \dots \rangle. \tag{A9}$$

E introducimos operadores de creación y aniquilación que nos permiten aumentar o disminuir el número de partículas que poblan cada modo:

$$\hat{b}_{l}^{\dagger}|N_{0}, N_{1}, ...N_{l}, ...\rangle = \sqrt{N_{l} + 1}|N_{0}, N_{1}, ...N_{l} + 1, ...\rangle,$$

$$\hat{b}_{l}|N_{0}, N_{1}, ...N_{l}, ...\rangle = \sqrt{N_{l}}|N_{0}, N_{1}, ...N_{l} - 1, ...\rangle,$$

$$\hat{N}_{l}|N_{0}, N_{1}, ...N_{l}, ...\rangle = \hat{b}_{l}^{\dagger}\hat{b}_{l}|N_{0}, N_{1}, ...N_{l}, ...\rangle = N_{l}|N_{0}, N_{1}, ...N_{l}, ...\rangle.$$
(A10)

En términos de estos operadores, uno puede intuitivamente escribir el Hamiltoniano de las N partículas como

$$\hat{H}_0^{(N)} = \sum_{m=0} E_m \hat{N}_m, \tag{A11}$$

donde bajo nuestras definiciones el eigenvalor para un estado con los mismos números de ocupación que en la ec. A7 es

$$E = \sum_{m}^{l_{max}} E_m N_m. \tag{A12}$$

Los operadores  $\hat{b}_l \ge \hat{b}_l^{\dagger}$  obedecen reglas de conmutación similares a las del oscilador armónico y se conocen como reglas de conmutación bosónicas

$$[b_l, b_{l'}] = 0$$
 (A13)

$$[\hat{b}_l^{\dagger}, \hat{b}_{l'}^{\dagger}] = 0 \tag{A14}$$

$$[\hat{b}_l, \hat{b}_{l'}^{\dagger}] = \delta_{l,l'} \tag{A15}$$

El formalismo de segunda cuantización entonces nos permite escribir un Hamiltoniano para N partículas en términos de operadores de número de sus modos  $E_m$ . Las interacciones entre dos partículas que interactuan bajo un potencial  $U(\mathbf{r})$ , se describen a través del término

$$\hat{H}_{I} = \sum_{i,j,l,m} U_{i,j}^{l,m} \hat{b}_{j}^{\dagger} \hat{b}_{j}^{\dagger} \hat{b}_{l} \hat{b}_{m},$$
(A16)

que se puede le er de la siguiente forma: Las interacciones toman dos partículas en los estados  $m \ge l \ge d$ interacción es el cambio de sus estados cuánticos a  $i \ge j$ , la amplitud de este proceso esta dada por el traslape entre las funciones de onda con el potencial de interacción, esto es,

$$U_{i,j}^{l,m} = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \phi_i^*(\mathbf{r}_1) \phi_j^*(\mathbf{r}_2) U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \phi_l(\mathbf{r}_2) \phi_m(\mathbf{r}_1).$$
(A17)

Cuando el potencial es una caja de volumenVy se eligen condiciones periódicas a la frontera, las eigen-funciones de onda son

$$\phi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\tag{A18}$$

con eigenvalores  $E_{\mathbf{k}} = k^2/2m$ . En esta base, el Hamiltoniano de muchos cuerpos se escribe como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \hat{b}^{\dagger}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \tilde{U}(\mathbf{q}) \hat{b}^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{b}^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}, \tag{A19}$$

donde  $\tilde{U}(\mathbf{k})$  denota la transformada de Fourier del potencial  $U(\mathbf{r})$  el cual se asume central.

# Gravedad, Geometría y Cuantización

Jerónimo Cortez\*

Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México. Ciudad de México 04510, México.

## 1. La fuerza que resultó ser geometría

En 1687 fueron publicados los Philosophiae Naturalis Principia Mathematica de Isaac Newton (1642-1727), obra que sentó las bases del desarrollo de la física y transformó para siempre la manera en que el ser humano habría de interrogar a la naturaleza. En los *Principia* se presentan las famosas tres leyes de la dinámica y la célebre Ley de la Gravitación Universal, que da cuenta del 'funcionamiento' de la primer interacción fundamental en ser descubierta: la gravedad. Es gracias a la Gravitación Universal que supimos que la Tierra está en caída perpetua en torno al Sol y que este fenómeno es el mismo (i.e., gobernado por la misma ley física) que el de la caída de una manzana en la Tierra. El éxito de la mecánica y gravitación newtonianas fue formidable, a tal grado que su aplicación llevó a predecir, y a posteriori descubrir, la existencia de un planeta. Con la idea de explicar ciertas irregularidades observadas en la órbita de Urano, Urbain Le Verrier (1811-1877) utilizó la teoría newtoniana para calcular la posición que habría de tener un hipotético planeta que las causara, compartió su resultado con el astrónomo Johann Gottfried Galle (1812-1910), quien al buscar en el firmamento donde los cálculos indicaban encontró, en efecto, un nuevo planeta –el octavo del sistema solar– Neptuno, descubierto en el otoño de 1846 gracias a una predicción fundamentada en la teoría de Newton [1].

No obstante su grandeza, la teoría newtoniana comenzó a ser objetada. Cuidadosas observaciones realizadas en el siglo XIX revelaron que el perihelio de Mercurio gira 43" de arco más, por siglo, de lo que predicen los cálculos basados en la gravitación de Newton<sup>1</sup>. Esta '*anomalía*' en la órbita de Mercurio trató de resolverse utilizando la misma idea que llevó al descubrimiento de Neptuno, fue el mismo Le Verrier quien planteó

<sup>\*</sup>jacq@ciencias.unam.mx

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Los datos observacionales indicaban una precesión de ~ 574" de arco por siglo, mientras que los cálculos con la teoría newtoniana arrojaban que ésta debía ser de 531"; es decir, había una discrepancia de 43" entre observación y teoría [2]. En la época, Simon Newcomb (1835-1909) fue quien confirmó la discrepancia dando el valor de 43" de exceso en la precesión por siglo [3].

entonces la existencia de un hipotético planeta interior, al que se llamó Vulcano y cuya órbita estaría entre el Sol y Mercurio, como el causante del comportamiento anómalo<sup>2</sup>. Sin embargo, a diferencia de lo que ocurrió con Neptuno, Vulcano no fue avistado. Los defensores de su existencia argumentaban entonces que la proximidad al Sol hacía en extremo difícil detectarlo. Con todo, había también quienes advertían que este planeta intramercurial podría simplemente no existir y que, de ser éste el caso, la teoría newtoniana estaría en franca crisis dada su discrepancia con la evidencia observacional. Para ese entonces -segunda mitad del siglo XIX- había además ya otro problema: la incompatibilidad de la naciente teoría de la electrodinámica, descrita por James C. Maxwell (1831-1879), con la teoría de Newton. Mientras que la física newtoniana es invariante ante transformaciones de Galileo, las ecuaciones de Maxwell son invariantes ante transformaciones de Lorentz. Esto significa que, o bien la física es invariante galileana y entonces las ecuaciones de Maxwell no son leves físicas, o bien la física es invariante lorentziana y entonces la mecánica newtoniana sólo puede ser válida en el régimen de bajas velocidades comparadas con la de la luz, que es justo el régimen en el que las transformaciones de Lorentz se aproximan a las transformaciones de Galileo. Los cuestionamientos que enfrentaba la teoría newtoniana no eran menores, Vulcano no se hallaba y la validez de las ecuaciones de Maxwell era corroborada una y otra vez por los experimentos. La crisis habría de resolverse, en definitiva, con la llegada de las teorías especial y general de la relatividad.

A inicios del siglo XX, concretamente en 1905, fue publicado en la revista Annalen der Physik [5] el trabajo en el que Albert Einstein (1879-1955) estableció los fundamentos de la teoría especial de la relatividad, presentando novedosas y desconcertantes ideas que trastocan profundamente nuestros sentidos newtonianos. En relatividad especial se desecha la noción de tiempo absoluto, y la transformación entre observadores inerciales ya no es sólo en el espacio, sino que incorpora también al tiempo, subrayando que espacio y tiempo no son entidades separadas e independientes, sino una sola: el espaciotiempo. El postulado fundamental en relatividad especial, es decir el que diferencía radicalmente a la teoría de la mecánica newtoniana, es aquél que estipula la existencia de una rapidez privilegiada, universal y límite superior en la naturaleza: La rapidez de la luz relativa a cualquier observador inercial es  $c = 3 \times 10^8$  m/s, independientemente del movimiento relativo entre la fuente de luz y el observador. El hecho de que la rapidez de la luz (en el vacío) sea una constante universal, implica que las transformaciones entre sistemas de referencia inerciales son las de Lorentz y que la entidad espacio-tiempo adquiere una estructura causal. La invariancia lorentziana, favorecida por relatividad especial, significa que la dinámica newtoniana es válida sólo cuando se consideran fenómenos a velocidades bajas comparadas con c. En lo que a gravitación newtoniana toca, resulta que ésta es incompatible con relatividad especial por dos razones estrechamente ligadas; a saber: la Ley de Gravitación Universal no es invariante ante transformaciones de Lorentz (i.e., no es una ley física en el marco de relatividad) y precisa, además, de una acción a distancia instantánea, prohibida por la estructura causal.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Para una lectura sobre la historia de Vulcano vease, por ejemplo, [4].

Puesto que Relatividad Especial es una teoría *sin* gravedad, quedó entonces la interrogante inmediata de cómo habría de ser una teoría de gravitación que incorporase los nuevos principios relativistas. Einstein abordó este problema y pasados diez años, en noviembre de 1915, dio a conocer su hallazgo: la Teoría General de Relatividad [6]. En esta teoría, la ecuación de campo de la gravitación –es decir, la ecuación que gobierna al campo gravitacional– es la famosa ecuación de Einstein<sup>3</sup>

$$R_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} R g_{\alpha\beta} = \kappa T_{\alpha\beta}, \qquad (1)$$

El lado izquierdo de (1) es exclusivamente geométrico, pues tanto el tensor como el escalar de Ricci,  $R_{\alpha\beta}$  y R, dependen sólo de la métrica  $g_{\alpha\beta}$  y sus segundas derivadas. Por otra parte, el lado derecho de la ecuación contempla en el tensor  $T_{\alpha\beta}$  el contenido de materia-energía que hubiere en el espacio-tiempo. La constante  $\kappa$  de proporcionalidad entre geometría y materia-energía es (en unidades geométricas<sup>4</sup>)  $\kappa = 8\pi$ . Las ecuaciones del campo gravitacional son ecuaciones diferenciales de segundo orden, no lineales, para la métrica.

Si bien Relatividad General reproduce la gravitación newtoniana en el régimen en el que la gravedad es débil y las velocidades son mucho menores que c, las teorías son radicalmente distintas. En la teoría newtoniana, por ejemplo, se tiene que el Sol crea instantáneamente un campo gravitacional que, al ejercer una fuerza sobre la Tierra, hace que ésta orbite en torno a él en lugar de seguir una trayectoria rectilínea. En contraste, según la relatividad general ninguna fuerza actúa sobre la Tierra, ésta viaja en movimiento libre a lo largo de una geodésica en el espacio-tiempo curvo que resulta de resolver las ecuaciones de campo (1) para el Sol<sup>5</sup>. Dicho de manera más general, la idea newtoniana de la gravedad, en la que los objetos masivos se atraen por la acción de una fuerza que actúa de manera instantánea, teniendo como escenario un espacio tridimensional plano e inerte en el que el tiempo transcurre inmutable, es sustituida en relatividad general por la idea de que la gravedad es geometría, curvatura del espacio-tiempo 4-dimensional. Los objetos masivos (y la energía misma) curvan el espacio-tiempo y viajan por las geodésicas de éste, que ahora es una entidad significativamente distinta al escenario que la mecánica clásica asume, pues se trata de un espacio que interactúa con su contenido de materia-energía y cuya geometría es dinámica. La visión inicial de la gravedad como una fuerza es reemplazada por la noción de que la gravedad es geometría, un cambio drástico que abrió nuevas e insospechadas ventanas de conocimiento.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>La ecuación (1) es una ecuación tensorial donde  $\alpha, \beta = 0, ..., 3$  son índices de espacio-tiempo. Para un estudio sistemático de la Teoría General de Relatividad pueden verse, por ejemplo, los libros de texto básicos [7] y [8], y los libros de texto más avanzados [9] y [10].

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Las unidades geométricas son aquellas en las que G = c = 1; estas son las unidades que con mayor frecuencia utiliza la comunidad relativista y serán las que aquí se empleen. En el sistema internacional de unidades  $\kappa = 8\pi G/c^4$ .

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>De manera más precisa: Primero se hallan las soluciones para (1) que describen el campo exterior de un cuerpo estático y con simetría esférica genérico; posteriormente se considera el caso particular del Sol (y la Tierra como una partícula de prueba).

La teoría relativista de la gravitación contempla tanto la dinámica del espacio-tiempo, como la de su contenido de materia y energía. En unas cuantas palabras, que no son otra cosa más que la adecuada lectura de la ecuación de campo (1), el físico teórico John A. Wheeler (1911-2008) capturó la esencia de la relatividad general:

### «La materia [y energía] le dice al espacio-tiempo cómo curvarse, y el espacio-tiempo le dice a la materia [y energía] cómo moverse».

A diferencia de las demás teorías de campo conocidas, en las que hay una separación entre *campo* –objeto fundamental– y *espacio-tiempo* –un mero escenario, inerte, en el que los campos se propagan–, la relatividad general es una teoría donde la geometría es dinámica (i.e., no hay una métrica de fondo fija no dinámica); no existe separación entre campo y espacio-tiempo, son la misma entidad. Relatividad General caracteriza a la gravedad como un producto de la geometría del espacio-tiempo.

El enigma del corrimiento de Mercurio, que desató grandes e intensos debates sobre la existencia o no de Vulcano durante la segunda mitad del siglo XIX, fue final y totalmente resuelto por la relatividad general, que predice con exquisita exactitud el comportamiento de la órbita de Mercurio, sin echar mano del hipotético planeta. La explicación de las anomalías orbitales de Urano y Mercurio marcaron, respectivamente, el triunfo y fin de la teoría newtoniana. La precesión de Mercurio es un fenómeno fuera del rango de validez del mundo newtoniano, su clarificación entrañó la primer confirmación de Relatividad General como teoría física. Es gracias a esta novedosa teoría de la gravedad que se predijo y descubrió también, entre otros fenómenos, la deflexión de la luz por objetos masivos, el corrimiento al rojo gravitacional, la existencia de agujeros negros y de ondas gravitatorias. Como una aplicación de la teoría nació la cosmología moderna, con la que habrían de llegar una serie de impresionantes predicciones y descubrimientos sobre nuestro universo.

## 2. Más allá de Einstein

Relatividad General es la mejor y más completa teoría con la que contamos para describir el espacio-tiempo. Sin embargo, no obstante su belleza e impresionantes logros, su régimen de validez no es ilimitado. Bajo ciertas circunstancias la teoría presenta *singularidades*, regiones límite espacio-temporales en las que cantidades físicas divergen<sup>6</sup>. Las singularidades no se interpretan como fenómenos que ocurran en la naturaleza, sino que más bien se entienden como la manifestación de que han sido superados los límites en que la teoría es confiable. Esta noción es empírica y se basa, principalmente, en el aprendizaje sobre la predicción errónea de inestabilidad atómica que la electrodinámica clásica hace. Si se considera la imagen clásica de un electrón en movimiento en torno a

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Para una discusión formal y completa sobre singularidades en Relatividad General ver, por ejemplo, [10].

un núcleo, la electrodinámica establece que el electrón habrá de radiar, pues está acelerado, perderá entonces energía y terminará colapsando hacia el núcleo. Según esta imagen no hay estabilidad atómica, lo que a todas luces contradice la evidencia observacional y, por consiguiente, debe concluirse que la predicción es errónea. ¿Significa esto que la electrodinámica no es una teoría válida? No, el problema de inestabilidad atómica lo resolvió Mecánica Cuántica, la otra gran teoría física del siglo XX, conllevando la explicación de que la teoría maxwelliana es válida en el régimen clásico, no así a escalas atómicas y subatómicas, donde gobiernan leyes cuánticas; la 'singularidad radiativa', que tiene como consecuencia la inestabilidad de la materia, no es pues un fenómeno que ocurra en la naturaleza, sino el aviso de que la teoría de Maxwell se ha utilizando fuera de rango. Este aprendizaje es el que se traslada al caso de Relatividad General, formando la idea de que las singularidades en ésta advierten no un suceso de la naturaleza, sino que la veracidad de la teoría va disminuyendo conforme la proximidad a una singularidad va aumentando. En Cosmología ocurre, por ejemplo, que 'al tiempo t = 0' hay una singularidad. Esto es, conforme nos aproximamos al llamado Big-Bang (singularidad cosmológica), la teoría einsteniana de la gravitación es cada vez menos confiable y capaz de describir los fenómenos físicos que se suceden a tiempos muy tempranos. Esto ha supuesto que conozcamos la historia de nuestro universo sólo a partir de un cierto tiempo y que la historia previa nos esté vedada<sup>7</sup>. Los agujeros negros son otro ejemplo de singularidad. Producto del colapso gravitacional de un cuerpo estático con simetría esférica, el agujero negro de Schwarzschild presenta una singularidad en el límite en el que la 'coordenada radial' de Schwarzschild tiende a cero,  $r \rightarrow 0$ , y sus entrañas, por tanto, no pueden explorarse (de manera fiable) con la sola teoría relativista. En las proximidades de la singularidad cosmológica ( $t \approx 0$ ) y de la singularidad del agujero negro  $(r \approx 0)$ , la física va más allá de Einstein. Al igual que la mecánica y la electrodinámica, la relatividad general es una teoría clásica cuyo poder predictivo toca término, acaba, cuando se abordan ciertos regímenes.

Las singularidades en relatividad son, por hipótesis, el síntoma de que la teoría no incorpora fenómenos físicos que, regidos por leyes que aún no conocemos, adquieren un papel dominante a escalas que se conjetura son del orden de la escala de Planck<sup>8</sup>. Estos fenómenos son de naturaleza *gravito-cuántica*, inaccesibles tanto para la relatividad general –que es una teoría clásica– como para la teoría cuántica –que no contempla a la geometría del espacio-tiempo, es decir a la gravedad–. A raíz de estas consideraciones, resulta clara la necesidad de contar con una teoría cuántica de la gravedad<sup>9</sup>; es decir,

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>La historia de nuestro universo según la cosmología moderna está razonablemente bien establecida a partir de  $t \approx 10^{-10} s$ . Antes es ciertamente especulativa, pero todavía a  $t \approx 10^{-36} s$ , donde se presume pudo dar comienzo una fase inflacionaria en el universo, parece ser confiable aún el uso de Relatividad General para describir la dinámica del universo [11, 12].

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup> La escala de Planck es definida por las constantes fundamentales de la naturaleza *G*, *c* y  $\hbar$ . La longitud, tiempo y masa de Planck son  $\ell_p = (G\hbar/c^3)^{1/2} \approx 1.6 \times 10^{-33} cm$ ,  $t_p = \ell_p/c \approx 5.4 \times 10^{-44} s$  y  $m_p = \ell_p c^2/G \approx 2.2 \times 10^{-5} g$ , respectivamente. A partir de estas cantidades fundamentales se derivan la energía, densidad y temperatura de Planck:  $E_p = m_p c^2 \approx 1.3 \times 10^{19} GeV$ ,  $\rho_p = m_p/\ell_p^3 \approx 5.2 \times 10^{93} g/cm^3$  y  $T_p = m_p c^2/k \approx 1.4 \times 10^{32} K$  (en la que se utiliza también la constante de Boltzmann k).

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Aquí se ha motivado la necesidad de una teoría cuántica de la gravedad a partir del problema de las

una teoría que concilie gravedad y cuántica, a través de la cual puedan ser descubiertos y descritos fenómenos gravito-cuánticos hoy totalmente desconocidos. Conseguir cuantizar a la gravedad, sin embargo, no es tarea menor. Por un lado, la relatividad general establece que la gravedad es geometría del espacio-tiempo y, por consiguiente, no es viable la cuantización que se lleva a cabo para otras teorías de campo clásicas (como la electrodinámica), donde se cuantiza el campo en un fondo fijo. Por otro lado, la teoría cuántica es una teoría no local y probabilística, en la que el fondo es un mero escenario clásico, fijo y no interactuante. Se tiene, además, la complicación de que los fundamentos de la teoría cuántica son poco entendidos en realidad. Murray Gell-Mann (1929-2019) a propósito de esto último se refiere a Mecánica Cuántica como a quella «misteriosa, confusa disciplina que nadie de nosotros realmente entendemos pero que sabemos como usar»[14]. De lograrse una teoría cuántica de la gravedad podremos explorar la física a energías descomunales, del orden de  $10^{19} GeV$  (energía de Planck), e indagar lo que ocurría en nuestro universo cerca del Big-Bang. Descubrir de qué está hecho el espaciotiempo y cómo es que sus constituyentes se combinan para, a partir de cierta escala, dar una imagen continua de éste. Será posible examinar la estructura más fina en el interior de un agujero negro y conocer las etapas finales de su evolución. Una teoría de gravedad cuántica supondrá inaugurar una nueva era en física, una revolución más en la ciencia.

La necesidad de una suerte de extensión cuántica de la relatividad general no es una observación nueva ni reciente, fue advertida desde 1916 por Einstein [15]:

# «...parece que la teoría cuántica tendría que modificar no sólo la electrodinámica maxwelliana, sino también la nueva teoría de la gravitación».

La búsqueda de una versión cuántica de la gravedad inició poco después de 1916, aunque el estudio sistemático y formal empezó realmente hasta los años treinta del siglo pasado<sup>10</sup>. Desde entonces han surgido diferentes programas destinados a cuantizar el campo gravitacional, entre ellos el programa de *Cuantización Canónica de la Gravedad*<sup>11</sup>, cuya tesis central es *la independencia del fondo* –la cuantización de la gravedad es la cuantización de la geometría–. La línea de investigación en cuantización canónica arrancó en los años cincuenta y corrió a cargo de Peter Bergmann (1915-2002) y Paul A. M. Dirac (1902-1984). Entre finales de los años cincuenta y principios de los sesenta, Richard Arnowitt (1928-2014), Stanley Deser (1931- ) y Charles W. Misner (1932- ), guiados e inspirados en los trabajos de Bergmann y Dirac, exhibieron la estructura canónica de la relatividad general en la hoy llamada *Formulación ADM* [19]. A partir de ésta, se elaboró la primer propuesta de cuantización canónica de la gravedad en el se-

singularidades. Esta es una buena y poderosa razón para emprender la búsqueda de tal teoría, pero no es la única. Consideraciones en el ámbito de gravedad semiclásica conducen también a la necesidad de una teoría cuántica de la relatividad general (ver por ejemplo [10]). Cabe añadir, igualmente, que en la línea de investigación que pretende la unificación de las cuatro interacciones fundamentales es central contar con una descripción cuántica del campo gravitatorio (ver por ejemplo [13]).

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup>Para una lectura sobre los primeros estudios en gravedad cuántica véase [16].

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup>Un recuento histórico sobre el desarrollo de este programa, así como el de otras propuestas, puede consultarse en [17] (ver también [18]).
gundo lustro de los sesenta; la cuantización, desafortunadamente, resultó insatisfactoria y hubo de ser desechada<sup>12</sup>. En los años setenta, época en la que el Modelo Estándar de Física de Partículas acaparó la atención de gran parte de los físicos en el mundo, la actividad en el campo de gravedad cuántica estuvo dominada por el estudio de aspectos de no renormalizabilidad de la teoría, supergravedad y teorías con derivadas de orden superior, quedando la cuantización canónica al margen del desarrollo. Sin embargo, la línea canónica resurgió a mediados de los años ochenta: Ahondando en trabajos que sobre conexiones espinoriales habían sido publicados en 1982 [20, 21], Abhay Ashtekar (1949-) consiguió especificar, en términos de una conexión SU(2) y su momento, una nueva formulación canónica de la relatividad general en la que ésta adquiere la forma de una teoría de norma tipo Yang-Mills. El paso de variables métricas a variables de conexión permitió aplicar técnicas no perturbativas de las teorías de norma y abrió una nueva ruta que habría de desembocar en la llamada Gravedad Cuántica de Lazos (GCL), la propuesta de cuantización de la gravedad independiente del fondo más avanzada hasta ahora, que fiel al carácter dual del campo gravitacional comporta desentrañar la naturaleza cuántica del espacio-tiempo.

En la búsqueda por descubrir la física que rige fenómenos gravito-cuánticos, GCL (o LQG, por las siglas en inglés de Loop Quantum Gravity) no es la única alternativa. Teoría de Cuerdas [22-24], por ejemplo, es una formulación que si bien tiene un objetivo más amplio -esencialmente tendiente a una descripción unificada de la física fundamentalpresumiblemente ha de contener una descripción cuántica de la gravedad. Existe, sin embargo, la duda sobre si teoría de cuerdas puede realmente proporcionar una descripción adecuada de la gravedad cuántica, pues la formulación no es (o es discutible que sea) genuinamente independiente del fondo [18]. Los esfuerzos por conseguir una teoría cuántica de la relatividad general han sido formidables y, pese a todo, es un hecho que a la fecha no contamos con una teoría completa y consistente. Las enormes dificultades en la cuantización han llevado a plantear la consideración de que la gravedad sea una interacción clásica fundamental; es decir, sin ningún origen cuántico. Respecto a esta cuestión pueden encontrarse algunos trabajos en la literatura especializada; para hacerse una idea sobre la deliberación de si los principios de la teoría cuántica aplican o no en gravedad, y sobre el requerimiento mismo de una teoría de gravedad cuántica, ver por ejemplo [10]–p.382– y [25]. Relatividad y Mecánica Cuántica fueron las dos grandes revoluciones de la física del siglo pasado, cambiaron drásticamente nuestra visión de la naturaleza reelaborando por completo nuestro entendimiento sobre materia, tiempo y espacio. La revolución de una teoría que concilie gravedad y cuántica quedó inconclusa, quizá reservada para ser el nuevo gran descubrimiento del presente siglo.

Aunque el cometido de contar con una teoría cuántica de la gravedad sigue inacabado, es justo decir que GCL ha tenido un avance consistente y significativo, que ha permitido incluso plantear ya posibles fenómenos físicos producto de la geometría cuántica. En lo que sigue se presentará un panorama general sobre ésta propuesta de cuantización

<sup>&</sup>lt;sup>12</sup>Para una exposición sobre Geometrodinámica Cuántica y algunos de los problemas que presenta ver, por ejemplo, [13].

de la gravedad; apenas un breviario que dibuje y dé una idea global sobre la formulación, sin entrar en detalles que eclipsen las ideas centrales (aunque sí será inevitable introducir cuestiones técnicas básicas). Para un estudio sistemático y completo de GCL pueden consultarse tanto libros de texto como artículos de distintos niveles (ver por ejemplo [26-40], que son referencia también para la siguiente sección).

### 3. Gravedad Cuántica de Lazos

Reformular a Relatividad General como una teoría de norma, *sin* referencia a una métrica de fondo, es el resultado clave que dio lugar al desarrollo del programa *Gravedad Cuántica de Lazos*. Dicha reformulación, inscrita en el marco canónico y conocida en la literatura como Relatividad en Variables de Conexión (o de Ashtekar), es esencialmente producto de aplicar una serie de transformaciones canónicas que, a partir del espacio fase ADM<sup>13</sup>, llevan a especificar como variables básicas de la teoría a una conexión *SU*(2) y su momento canónico conjugado. En este apartado empezaremos exhibiendo cuáles son precisamente estas transformaciones canónicas, es decir exponiendo cómo se alcanza la descripción en variables de conexión, para después esbozar, una vez establecido *el terreno clásico propicio*, la cuantización a la lazos del sistema.

#### Relatividad General en Variables de Conexión:

Sea *M* un espacio-tiempo globalmente hiperbólico; esto es, *M* admite una función global de tiempo  $t : M \to \mathbb{R}$ , tal que cada superficie  $t = cte., \Sigma_t$ , es una superficie de Cauchy (i.e., *M* es foliada por la familia uniparamétrica de superficies de Cauchy  $\Sigma_t$ ). *M* es topológicamente equivalente a  $\Sigma \times \mathbb{R}$ , con  $\Sigma_t \cong \Sigma$  para toda *t*. Entonces, de la formulación Lagrangiana de la relatividad general –en la que las ecuaciones de campo son las ecuaciones de Einstein (1) para la métrica  $g_{\alpha\beta}$ – podemos pasar a la formulación Hamiltoniana (ADM), donde las variables canónicas (también llamadas variables ADM) son la tres-métrica  $h_{ab}$  en  $\Sigma$  y su momento canónico conjugado  $p^{ab}$ , dado por  $16\pi p^{ab} = \sqrt{h}(K^{ab} - Kh^{ab})$ , donde  $K^{ab}$  y *K* son la curvatura extrínseca y su traza, mientras que *h* es el determinante de  $h_{ab}$ . Los índices a, b = 1, 2, 3 son índices espaciales. El Hamiltoniano gravitacional, cuando  $\Sigma$  es compacta<sup>14</sup>, es  $H_g = \int_{\Sigma} d^3 x (NC+N^aC_a)$ , donde la función de lapso *N* y el vector de corrimiento  $N^a$  son variables no dinámicas asociadas a la foliación<sup>15</sup>, *C* es la *constricción Hamiltoniana* y  $C_a$  denota las *constricciones de* 

<sup>&</sup>lt;sup>13</sup>El espacio fase en la formulación Hamiltoniana de Arnowitt, Deser y Misner (ADM) para Relatividad General.

<sup>&</sup>lt;sup>14</sup>Si Σ no es compacta (i.e., el espacio-tiempo no es espacialmente compacto),  $H_g$  tiene además términos de frontera. Para fines de lo que en esta sección se discute esos términos no son relevantes, de manera que sin pérdida de generalidad se supondrá a Σ compacta.

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup>En una foliación se tiene un campo vectorial  $t^{\alpha}$  de flujo temporal sobre M, tal que  $t^{\alpha}\partial_{\alpha}t = 1$ . Las componentes normal y tangencial a  $\Sigma_t$  de  $t^{\alpha}$  son, respectivamente, N y  $N^a$ . Salvo la condición  $t^{\alpha}\partial_{\alpha}t = 1$ ,  $t^{\alpha}$  es arbitrario y, por tanto, N y  $N^a$  también lo son.

difeomorfismos,

$$16\pi C = \sqrt{h} \left[ h^{-1} \tilde{p}^{ab} \tilde{p}_{ab} - \frac{1}{2} h^{-1} \tilde{p}^2 - {}^{(3)}R \right] = 0, \quad 16\pi C_a = -2D_b \tilde{p}^b_a = 0.$$
(2)

Aquí  $\tilde{p}^{ab} := 16\pi p^{ab}$  y <sup>(3)</sup>*R* es el escalar de Ricci asociado a la tres-métrica  $h_{ab}$ . La formulación Hamiltoniana de la relatividad *a la* ADM es, esencialmente, una formulación en términos de constricciones. No todos los estados en el espacio fase ADM son estados físicos, lo son sólo aquellos que satisfacen las constricciones (2). La subvariedad del espacio fase ADM que (2) define se preserva bajo los movimientos generados por las constricciones (*C* y *C<sub>a</sub>* forman un sistema de primera clase). Puesto que hay cuatro constricciones y seis grados de libertad en la configuración  $h_{ab}$ , se sigue entonces que el número de grados físicos de libertad es (6 – 4) = 2, que es, en efecto, el número de grados de libertad de la relatividad general.

Considérense ahora las variables  $K_{ai} := K_{ab} e_i^a$  y  $E_i^a := \sqrt{h} e_i^a$ , donde  $e_i^a$  es un marco de triadas en  $\Sigma$ ; es decir, campos que definen una base ortonormal en cada punto del espacio<sup>16</sup>,  $h_{ab}e_i^a e_j^b = \delta_{ij}$ . Es fácil mostrar que  $h^{ab} = \delta^{ij}e_i^a e_j^b$ , de donde se sigue que la métrica es invariante ante rotaciones locales SO(3) de la triada. Realizando cálculos algebraicos, largos pero sin mayor complicación, se reescriben las constricciones (2) en términos de las variables  $K_a^i$  y  $E_i^a$ . A partir del álgebra de Poisson de las variables ADM se obtiene el álgebra de Poisson para las variables  $K_a^i$  y  $E_j^a$ , verificándose que  $(K_a^i, E_j^a)$  es un par canónico y que  $E_i^a \dot{K}_a^i = -8\pi h_{ab} \dot{p}^{ab}$ . Adicionalmente, de la simetría de  $K_{ab}$  (i.e., de  $K_{ab} = K_{ba}$ ) se sigue que  $K_{a[i}E_{i]}^{a} = 0$ , y no es difícil ver que esta condición puede expresarse equivalentemente como  $\mathcal{G}_i = \epsilon_{ijk} K_a^j E^{ka} = 0$ . Esto significa que en el espacio fase extendido<sup>17</sup>  $\{(K_a^i, E_i^a)\}$  deben imponerse, además de las constricciones C y  $C_a$ , las constricciones de Gauss  $G_i$ . Estas últimas son generadoras de la norma rotacional y aseguran también la simetría de  $K_{ab}$ . El conjunto de constricciones  $\{C, C_a, G_i\}$  sobre el espacio fase extendido garantiza la preservación del número de grados físicos de libertad: 9 - (4 + 3) = 2. El Hamiltoniano gravitacional  $H'_g$  en el espacio fase extendido es  $H_g$ , escrito ahora en términos de (K, E), más un término de la forma  $\int_{\Sigma} \xi^i \mathcal{G}_i$ . La formulación canónica en el espacio fase  $\{(K_a^i, E_i^a)\}$  reducido por la constricción de Gauss es completamente equivalente a la formulación ADM; esto es, la transformación  $(h_{ab}, p^{ab}) \rightarrow (K_a^i, E_i^a)|_{G_i=0}$  es una transformación canónica.

La formulación en variables de conexión resulta de llevar a cabo dos transformaciones canónicas más. La primer transformación es un reescalamiento constante,  $(K_a^i, E_j^b) \rightarrow$  $(\gamma K_a^i, \gamma^{-1} E_j^b)$ , donde el factor real no nulo  $\gamma$  es conocido como el parámetro de Immirzi (o Barbero-Immirzi). Aunque clásicamente el valor de  $\gamma$  es irrelevante (descripciones con distintos valores del parámetro son equivalentes), resulta que cantidades físicas en

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup>En la triada  $e_i^a$ , el índice *a* es un índice espacial (como antes), mientras que *i* = 1, 2, 3 denota un índice interno. Asociado al marco de triadas está el dual de cotriadas,  $e_a^i$ , y se tiene que  $e_a^i e_a^i = \delta_i^i$  y  $e_a^i e_b^i = \delta_b^a$ .

<sup>&</sup>lt;sup>17</sup>Se le llama espacio fase extendido pues ahora se tienen 9 grados de libertad en la configuración  $K_a^i$ , en lugar de los 6 que se tenían para  $h_{ab}$ .

la teoría cuántica dependen de  $\gamma$  y, consecuentemente, su valor debe fijarse a través de criterios físicos (ver más adelante). La segunda transformación canónica consiste en sumar a la configuración  $\gamma K_a^i$  la conexión de espín  $\Gamma_a^i$ , obteniendo entonces conexiones  $A_a^i = \Gamma_a^i + \gamma K_a^i$  como variables de configuración<sup>18</sup>. Los paréntesis de Poisson entre las variables básicas son

$$\{A_a^i(x), E_j^b(y)\} = 8\pi \gamma \,\delta_b^a \,\delta_i^i \,\delta^3(x, y),\tag{3}$$

con el resto siendo idénticamente nulos. Puesto que<sup>19</sup>  $\int_{\Sigma} E_i^a \dot{K}_a^i = \gamma^{-1} \int_{\Sigma} E_i^a \dot{A}_a^i$ , el Hamiltoniano gravitacional es simplemente  $H'_g$  escrito en las nuevas variables (A, E).

Al reescribir  $16\pi C$  y  $16\pi C_a$  en términos de A y  $\gamma^{-1}E$ , se obtiene que en ambas expresiones hay términos donde aparece la constricción de Gauss; resulta, sin embargo, que estos términos pueden omitirse [27] y considerarse entonces las constricciones equivalentes  $16\pi C(A, \gamma^{-1}E) \rightarrow C'(A, \gamma^{-1}E) = \gamma^{-1} \mathcal{H}(A, E)$  y  $16\pi C_a(A, \gamma^{-1}E) \rightarrow \mathcal{H}_a(A, \gamma^{-1}E) =$  $\gamma^{-1}\mathcal{H}_a(A, E)$ . Las constricciones Hamiltoniana  $\mathcal{H}(A, E)$ , de difeomorfismos  $\mathcal{H}_a(A, E)$  y de Gauss  $\mathcal{G}_i(A, \gamma^{-1}E) = \gamma^{-1}\mathcal{G}_i(A, E)$  forman un sistema de primera clase y están dadas por

$$\mathcal{H}(A,E) = \left[F_{ab}^{j} - (\gamma^{-2} + 1)\varepsilon_{jmn}(A_{a}^{m} - \Gamma_{a}^{m})(A_{b}^{n} - \Gamma_{b}^{n})\right]\frac{\gamma\varepsilon_{jkl}E^{ak}E_{k}^{bl}}{\sqrt{|\det(E)|}},$$
  
$$\mathcal{H}_{a}(A,E) = F_{ab}^{j}E_{j}^{b}, \qquad \mathcal{G}_{i}(A,E) = \mathcal{D}_{a}E_{j}^{a}, \qquad (4)$$

donde  $F_{ab}^{i} = 2\partial_{[a}A_{b]}^{i} + \varepsilon^{i}{}_{kl}A_{a}^{k}A_{b}^{l}$  es la curvatura asociada a la conexión  $A_{a}^{i}$  y  $\mathcal{D}_{a}E_{j}^{a}$  $\partial_a E_i^a + \varepsilon_{jkl} A_a^k E^{al}$ . Nótese que la constricción  $\mathcal{G}_i$  tiene la forma de la ley de Gauss para una teoría de Yang-Mills, de ahí el nombre constricción de Gauss. No es difícil verificar que  $\mathcal{G}(\xi) = \int_{\Sigma} \xi^{i} \mathcal{G}_{i}$  genera la transformación infinitesimal  $A_{a}^{\prime i} = A_{a}^{i} - 8\pi \mathcal{D}_{a} \xi^{i}$  (i.e.,  $\{A_a^i, \mathcal{G}(\xi)\} = -8\pi \tilde{\mathcal{D}}_a \xi^i$ , que corresponde justamente a la transformación infinitesimal que en una teoría de norma SU(2) tiene la conexión<sup>20</sup>; es decir, es la versión infinitesimal de  $A_a \to A'_a = g(\partial_a + A_a)g^{-1}$ , con  $g \in SU(2)$  y  $A_a = A^i_a \tau_i$ , donde  $\tau_i$  son los generadores del álgebra de Lie de SU(2) que satisfacen  $[\tau_i, \tau_j] = \varepsilon_{ij}^k \tau_k$ .

El Hamiltoniano gravitacional (tomando en cuenta la redefinición de las constricciones) está dado por  $16\pi\gamma H_g(A, E) = \int_{\Sigma} [N\mathcal{H}(A, E) + N^a\mathcal{H}_a(A, E) + \xi^i \mathcal{G}_i(A, E)].$  La acción de Relatividad General en variables de conexión reales<sup>21</sup> (para el caso espacialmente compacto) está dada entonces por

$$S[A, E] = \frac{1}{16\pi\gamma} \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\Sigma} \left[ 2E_i^a \dot{A}_a^i - (N\mathcal{H} + N^a\mathcal{H}_a + \xi^j \mathcal{G}_j) \right].$$
(5)

<sup>18</sup>La conexión de espín  $\Gamma_a^i = \Gamma_a^i(E)$  proviene de considerar la derivada covariante compatible con las triadas. El paréntesis de Poisson entre  $\Gamma_a^i$  y  $E_j^b$  es nulo, por lo que  $\{A, \gamma^{-1}E\} = \{K, E\}$ .

<sup>19</sup>En efecto,  $\int_{\Sigma} E_i^a \dot{K}_a^i = \gamma^{-1} \int_{\Sigma} E_i^a \dot{A}_a^i$  pues  $\int_{\Sigma}^{I} E_i^a \dot{\Gamma}_a^i = 0$  (ver por ejemplo [27]). <sup>20</sup>Puesto que las álgebras de Lie de *SO*(3) y *SU*(2) son isomorfas, podemos considerar como grupo de norma a SU(2) en lugar de SO(3).

<sup>21</sup>Originalmente la reformulación consideraba conexiones complejas, en las que si bien la constricción Hamiltoniana adquiere una forma más sencilla se presentan problemas con la implementación de las condiciones de realidad. A raíz de ello se propuso la variante con conexiones reales, que evitan lidiar con condiciones de realidad y proveen una interpretación directa de la (re)formulación Hamiltoniana como una teoría de norma SU(2) tipo Yang-Mills.

#### Cuantización a la Lazos:

Las variables clásicas elementales de las que parte el programa de GCL son variables de carácter distribucional e independientes del fondo que, de forma natural, se construyen a partir de la conexión SU(2) y su momento; a saber, la asociada al transporte paralelo que define (y es definido por) la conexión A a lo largo de curvas y el flujo de E a través de 2-superficies. Explícitamente,

$$h_{\ell}[A] = \mathcal{P} \exp \int_{\ell} A_a \, d\ell^a \,, \quad E_{f,S} = \int_{S} f^i E_i^a d^2 S_a, \tag{6}$$

donde  $\ell$  es una curva,  $\mathcal{P}$  el ordenamiento de caminos, S una 2-superficie en  $\Sigma$  y  $f^i$  funciones de prueba. Las holonomías<sup>22</sup>  $h_{\ell}$  son variables de configuración, mientras que los flujos  $E_{f,S}$  son variables de momento. Nótese que dada una gráfica cerrada  $\Gamma$ , es decir un conjunto de N aristas  $e_l$  (l = 1, ..., N) y M vértices  $v_m$  (m = 1, ..., M) en  $\Sigma$ , con la restricción de que no quede ningún extremo suelto, podemos considerar el transporte paralelo a lo largo de sus aristas y, como  $h_{e_l}[A] \in SU(2)$  para cada una de éstas, entonces asociado a  $\Gamma$  se tienen los mapeos  $A \mapsto \lambda_{\Gamma}[A] = (h_{e_1}[A], ..., h_{e_N}[A]) \in [SU(2)]^N$  y  $A \mapsto \psi_{(\Gamma,f)}[A] \in \mathbb{C}, \psi_{(\Gamma,f)} = f \circ \lambda_{\Gamma}$ , donde  $f : [SU(2)]^N \to \mathbb{C}$  es suave. En las etapas iniciales de GCL el énfasis en la construcción estaba en las variables de lazo  $(h_{\ell} \text{ con } \ell \text{ un lazo, una curva cerrada simple})$  y de ahí el origen del nombre gravedad cuántica *de lazos*.

El primer paso en el proceso de cuantización consiste en promover a las variables de configuración y momento (6) a operadores abstractos,  $\hat{h}_{\ell}$  y  $\hat{E}_{f,S}$ , y considerar el álgebra  $\mathfrak{A}$ que generan. Después, como siguiente paso, debe representarse el álgebra en un espacio de Hilbert. Esta parte del proceso es delicada, pues hay una serie de ambigüedades que, de no fijarse, resultan en una infinidad de posibles representaciones que (en general) no son unitariamente equivalentes. En efecto, en teorías con grados locales de libertad no se tiene un teorema de unicidad análogo al Teorema de Stone-von Neumann, que garantiza la unicidad en la cuantización de sistemas mecánicos lineales [41], y deben buscarse entonces criterios extra (físicamente plausibles) que al imponerse seleccionen entre la infinidad de posibles representaciones *una* (módulo equivalencia unitaria) que sea predilecta. En teoría cuántica de campos en fondo plano, por ejemplo, el requerimiento de invariancia bajo el grupo de Poincaré selecciona un vacío (módulo transformaciones unitarias) y remueve la ambigüedad inherente al proceso de representación. En espaciotiempos estacionarios se explota la simetría de traslación temporal para establecer un criterio de unicidad en la cuantización [42, 43]. Cuando las simetrías no son suficientes para especificar una cuantización predilecta, como genéricamente ocurre en teorías de campo en fondos curvos no estacionarios o en sistemas de campo manifiestamente no estacionarios, el añadir a la invariancia bajo las simetrías el criterio de implementación unitaria

<sup>&</sup>lt;sup>22</sup>Estrictamente hablando,  $h_{\ell}$  es una holonomía si  $\ell$  es una curva cerrada simple. Aquí usaremos la terminología menos precisa que se utiliza muchas veces en física y en la que el propagador de transporte paralelo  $h_{\ell}$  es llamado holonomía no sólo para curvas cerradas.

*de la dinámica* ha permitido extraer *una* cuantización predilecta en sistemas con escasa simetría (para un compendio sobre esto último ver [44, 45]). En Relatividad General lo natural es pedir invariancia ante difeomorfismos. Este requerimiento es precisamente el que se impone y, exitosamente, discrimina entre las posibles representaciones de  $\mathfrak{A}$  (i.e., selecciona una representación). En concreto, el álgebra se representa como sigue: Al igual que en mecánica cuántica, se considera una representación a la Schrödinger en la que los estados son representados por funciones de onda del espacio de configuración, y en la que los operadores básicos de configuración y momento actúan, respectivamente, por multiplicación y diferenciación. Específicamente, se contempla como Hilbert cinemático a un espacio de la forma  $H_{cin}^{\mu} = L^2(\bar{\mathcal{A}}, d\mu)$ , donde el espacio de configuración cuántico  $\bar{\mathcal{A}}$  es una 'extensión' del espacio de configuración  $\mathcal{A}$  de conexiones suaves<sup>23</sup> y  $\mu$  es una medida en  $\bar{\mathcal{A}}$ . Sobre  $H_{cin}^{\mu}$  se representa al operador de configuración  $\hat{h}_{\ell}$  por multiplicación,  $\hat{h}_{\ell}\psi = h_{\ell}\psi$ . La representación del operador de momento  $\hat{E}_{f,S}$  en  $H^{\mu}_{cin}$ , por otro lado, está relacionada con la medida y puede no ser simplemente la asociada a  $\hat{E}_{i}^{a} = \delta/\delta A_{a}^{i}$ , sino que además tenga que añadirse a ésta un término multiplicativo que conmute con el operador de configuración<sup>24</sup>. En general se tiene que distintas medidas dan diferentes (i.e., no equivalentes) representaciones del álgebra,  $[\mathfrak{A}, H_{cin}^{\mu_1}] \neq [\mathfrak{A}, H_{cin}^{\mu_2}];$ es decir, la ambigüedad en la cuantización reside en la elección de  $\mu$ . Esta ambigüedad fue eliminada en 2006 (ver [47]): la invariancia estricta bajo difeomorfismos selecciona una medida  $\mu_{AL}$  (conocida como medida de Ashtekar-Lewandowski) y, por tanto, una representación predilecta del álgebra<sup>25</sup> [ $\mathfrak{A}, H_{cin} = L^2(\bar{\mathcal{A}}, d\mu_{AL})$ ].

El espacio de Hilbert  $H_{cin}$  tiene una descomposición asociada a gráficas que, además de útil, provee cierta imagen física sobre este complicado espacio. Para evitar un uso excesivo de tecnicismos, aquí sólo se esbozará la descomposición (los detalles pueden consultarse en [31-34, 36, 39]). La primera observación es que asociado a la gráfica más simple en  $\Sigma$ , es decir un lazo o una arista e, se tiene el espacio de Hilbert  $H_e = L^2(SU(2), d\mu_H)$ , donde  $\mu_H$  es la medida de Haar [medida natural en SU(2)]; en efecto, dada e podemos construir  $H_e$  considerando todas las funciones  $f(g) = (f \circ \lambda_e)[A]$ ,  $g = h_e[A] \in SU(2)$ , de cuadrado integrable respecto a  $\mu_H$ . Ahora bien, por la descomposición de Peter-Weyl sabemos que  $f \in H_e$  puede desarrollarse en términos de las representaciones irreducibles de SU(2),

$$f(g) = \sum_{j} \sqrt{j(j+1)} f_{j}^{mn} \pi_{mn}^{j}(g).$$
(7)

<sup>&</sup>lt;sup>23</sup>En teoría cuántica de campos los estados son funciones definidas sobre *el espacio de configuración cuántico*  $\overline{C}$ , que típicamente es distinto al espacio de configuración clásico C. Por ejemplo, para el caso de un campo de Klein-Gordon en Minkowski, donde C es el espacio de funciones suaves  $\varphi(x)$  con soporte compacto en una hipersuperficie plana  $\Sigma$ , el espacio de configuración cuántico  $\overline{C}$  es el dual topológico del espacio de Schwartz  $\mathscr{S}$ .

<sup>&</sup>lt;sup>24</sup>Para efectos ilustrativos sobre la relación medida-representación del operador de momento puede verse por ejemplo [46], donde se considera la teoría de campo escalar.

<sup>&</sup>lt;sup>25</sup>Representaciones alternativas para GCL han sido exploradas relajando condiciones del teorema de unicidad presentado en [47] (ver por ejemplo [48]). Cabe señalar, adicionalmente, que existe la observación de que la prueba de unicidad podría robustecerse con un resultado más fuerte, basado en la *implementación unitaria* de los difeomorfismos espaciales y no sólo en la invariancia estricta (ver Secc.3 en [49]).

Aquí, j = 0, 1/2, 1, 3/2, ..., m, n = -j, ...j, las funciones  $\sqrt{j(j+1)} \pi_{mn}^{j}$  forman una base ortonormal completa en  $H_e$  y  $f_j^{mn}$  son los coeficientes del desarrollo. Para cada j,  $\pi_{mn}^{j}$  genera el espacio  $H_j \otimes H_j^*$ , donde  $H_j$  corresponde al espacio de Hilbert (2j + 1)dimensional de 'una partícula con espín j', mientras que  $H_j^*$  es su espacio dual. Se tiene entonces que  $H_e$  puede descomponerse como  $H_e = \bigoplus_j (H_j \otimes H_j^*)$ . La gráfica e etiquetada con j puede pensarse como la imagen gráfica de la representación  $\pi_{mn}^{j}$  (que como se dijo, genera a  $H_j \otimes H_j^*$ ). Para una gráfica cerrada cualquiera  $\Gamma$  con N aristas se sigue que  $H_{\Gamma} = \bigotimes_{e_l} H_{e_l}$ , donde  $H_{e_l} = \bigoplus_j (H_j^{e_l} \otimes H_j^{e_l^*})$ . No es difícil ver que  $H_{\Gamma}$  puede reescribirse como  $H_{\Gamma} = \bigoplus_j H_{\Gamma,j}$ , donde  $\mathbf{j} = \{j_1, \ldots, j_N\}$  y  $H_{\Gamma,j} = \bigotimes_{e_l} (H_{j_l}^{e_l} \otimes H_{j_l}^{e_l^*})$ . La gráfica  $\Gamma$  etiquetada en cada arista  $e_l$  por  $j_l$  es la imagen gráfica de la representación  $\pi_{m_l}^{j_l}$  en cada arista  $(\pi_{m_ln_l}^{j_l}$  genera a  $H_{j_l}^{e_l} \otimes H_{j_l}^{e_l^*}$ , la expresión para  $H_{\Gamma,j}$  permite entonces asociar a la gráfica  $\Gamma$  etiquetada por  $\mathbf{j}$  con el producto  $\pi_{m_1n_1}^{j_1} \cdots \pi_{m_Nn_N}^{j_N}$ ). Esto último simplemente pone de relieve que una base ortonormal completa para  $H_{\Gamma}$  está dada por el producto de las funciones  $\phi_{m_ln_l}^{j_l} = \sqrt{j_l(j_l+1)} \pi_{m_n}^{j_l}$ ; es decir,  $f \in H_{\Gamma}$ , donde  $f(g_1, ..., g_N) = (f \circ \lambda_{\Gamma})[A]$ con  $g_l = h_{e_l}[A]$ , puede escribirse como

$$f(g_1, ..., g_N) = \sum_{j_1...j_N} f_{j_1...j_N}^{m_1...m_N, n_1...n_N} \phi_{m_1n_1}^{j_1}(g_1) \cdots \phi_{m_Nn_N}^{j_N}(g_N).$$
(8)

El espacio  $H_{\Gamma,j}$  puede, a su vez, descomponerse en términos de representaciones irreducibles. En efecto, en cada vértice de la gráfica se tiene el momento angular total de las aristas que en él convergen, un cuidadoso análisis relacionado con la adición de momento angular permite descomponer entonces a  $H_{\Gamma,j}$  como  $H_{\Gamma,j} = \bigoplus_l H_{\Gamma,j,l}$ , donde  $\mathbf{l} = \{l_1, \ldots, l_M\}$  asigna a cada vértice de  $\Gamma$  una representación irreducible de la transformación de norma. En suma,  $H_{\Gamma} = \bigoplus_{j,l} H_{\Gamma,j,l}$  y el subespacio de  $H_{\Gamma}$  con  $\mathbf{l} = 0$  es invariante de norma. A las gráficas etiquetadas con números semi-enteros (0, 1/2, 1, 3/2, ...) se les conoce en la literatura como redes de espín (*spin networks*, en inglés).

Nótese que el producto interno en  $H_{\Gamma}$  define, de manera natural, un producto para las funcionales  $\psi_{(\Gamma,f)} = (f \circ \lambda_{\Gamma})$ ,

$$(\psi_{(\Gamma,f)}, \psi_{(\Gamma,f')}) := \int \prod_{l} d\mu_{H}(g_{l}) \,\bar{f}(g_{1}, ..., g_{N}) f'(g_{1}, ..., g_{N}) \,. \tag{9}$$

A partir de éste se puede definir el producto entre funcionales de diferentes gráficas. Si  $\Gamma_1$  y  $\Gamma_2$  son diferentes gráficas, se considera la gráfica  $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ , se extienden trivialmente a ésta  $f_1$  y  $f_2$ , y sobre  $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$  se define el producto como en (9),

$$(\psi_{(\Gamma_1,f_1)},\psi_{(\Gamma_2,f_2)}) := (\psi_{(\Gamma_1\cup\Gamma_2,f_1)},\psi_{(\Gamma_1\cup\Gamma_2,f_2)}).$$
(10)

El espacio de Hilbert cinemático  $H_{cin}$  corresponde al espacio que contiene todos los espacios de Hilbert en  $\{H_{\Gamma} | \Gamma$  es una gráfica en  $\Sigma$ }; es decir, el Hilbert cinemático tiene la estructura ' $H_{cin} = \bigcup_{\Gamma} H_{\Gamma}$ '. Esto sugiere descomponer a  $H_{cin}$  como la suma directa de los espacios de Hilbert  $H_{\Gamma}$ . Aunque esta idea no puede implementarse en forma directa,

pues cierto tipo de redundancia lo impide [31], sí es posible llevarla a cabo una vez que la obstrucción es removida. En concreto, el Hilbert cinemático se descompone como  $H_{cin} = \bigoplus_{\Gamma} H'_{\Gamma}$ , donde  $H'_{\Gamma}$  está compuesto por los subespacios  $H_{\Gamma, \mathbf{j}, \mathbf{l}}$ , como antes, pero donde ahora  $\mathbf{j}$  y  $\mathbf{l}$  están sujetos a ciertas condiciones que eliminan la redundancia (ver [31, 34]). Ésta es la descomposición del Hilbert cinemático en la base de redes de espín. Puesto que  $H_{cin} = L^2(\bar{\mathcal{A}}, d\mu_{AL})$ , el producto (10) entre funcionales  $\psi$  está dado ('en su dominio natural') por

$$(\psi_{(\Gamma_1,f_1)},\,\psi_{(\Gamma_2,f_2)}) = \int d\mu_{AL}\,\bar{\psi}_{(\Gamma_1,f_1)}[A]\,\psi_{(\Gamma_2,f_2)}[A]\,. \tag{11}$$

En notación de Dirac,  $\psi[A] = \langle A | \psi \rangle$  es la función de onda para el estado  $|\psi \rangle$  y  $\langle \psi | \psi' \rangle$  está dado por la ec. (11),  $\langle \psi | \psi' \rangle = (\psi, \psi')$ . Puesto que  $\psi_{(\Gamma,f)}[A] = \langle A | \psi_{(\Gamma,f)} \rangle = (f \circ \lambda_{\Gamma})[A]$ , entonces de (8) se sigue que el estado  $|\psi_{(\Gamma,f)}\rangle$  se expande en la base  $|\Gamma; j_l, m_l, n_l\rangle$ , con  $\langle A | \Gamma; j_l, m_l, n_l \rangle = \phi_{m_1 n_1}^{j_1}(g_1) \cdots \phi_{m_N n_N}^{j_N}(g_N)$ .

El espacio de Hilbert físico  $H_f$  se determina implementando la versión cuántica de las constricciones (4). Se imponen primero las constricciones de Gauss, obteniendo el espacio solución  $H_G \subset H_{cin}$  de estados cuánticos invariantes ante la norma interna<sup>26</sup>. Después se implementan las constricciones de difeomorfismos espaciales, determinando entonces el Hilbert  $H_{G,Dif}$  libre de constricciones gaussianas y de difeormofismos. Finalmente, debe establecerse la contraparte cuántica de la constricción Hamiltoniana e imponerse en  $H_{G,Dif}$  para determinar el espacio  $H_f$  de estados físicos. Esta última parte no ha sido todavía plena y satisfactoriamente completada en el programa de cuantización; determinar (completa y consistentemente, sin ambigüedad alguna) a  $H_f$  es un importante pendiente en la cuantización.

Un aspecto crucial en gravedad cuántica de lazos es la presencia de operadores geométricos con espectro discreto: GCL provee una noción de la naturaleza cuántica del espacio-tiempo, con una estructura discreta en la que se tienen cuantos geométricos. Por ejemplo, para el operador de área <sup>27</sup>  $\hat{A}[S]$ , que corresponde a la observable clásica  $A[S] = \int_{S} d^2 \sigma (n_a E_i^a n_b E_j^b \delta^{ij})^{1/2}$ , los estados de red de espín  $|\Gamma; j_l, \iota_k\rangle$  son estados propios; dada una superficie S y una gráfica  $\Gamma$  que, por ejemplo, perfore (atraviese) a S una única vez y con una única arista, etiquetada digamos por j', se tiene que  $\hat{A}[S]|\Gamma; j_l, \iota_k\rangle$  es proporcional a  $|\Gamma; j_l, \iota_k\rangle$  y el valor propio de la igualdad está dado por  $8\pi\gamma \ell_p^2 \sqrt{j'(j'+1)}$ [Nótese que aquí aparece la longitud de Planck  $\ell_p$ ; en unidades de Planck ( $G = c = \hbar = 1$ )  $\ell_p = 1$ , mientras que en el sistema cgs  $\ell_p \approx 1.6 \times 10^{-33} cm$ , como se había mencionado en el pié de página 8]. Más general,

$$\hat{A}[S] |\Gamma; j_l, \iota_k\rangle = 8\pi \gamma \, \ell_p^2 \sum_p \sqrt{j_p(j_p+1)} \, |\Gamma; j_l, \iota_k\rangle, \tag{12}$$

 $<sup>^{26}</sup>H_G$  es el subespacio de  $H_{cin}$  que define  $\mathbf{l} = 0$ ; la invariancia de norma impone condiciones sólo en los vértices de la gráfica. Los estados S U(2)-invariantes  $|\Gamma; j_l, \iota_k\rangle$  ( $|\Gamma; j_l, m_l, n_l\rangle \rightarrow |\Gamma; j_l, \iota_k\rangle$ ) están etique-tados por las  $j_l$  de las aristas  $e_l$  y por unas nuevas cantidades  $\iota_k$  en los nodos  $\nu_k$ , llamadas entrelazadores (*intertwiners*).

<sup>&</sup>lt;sup>27</sup>Como parte de los operadores geométricos se tienen también operadores de volumen y longitud.

donde el índice *p* corre sobre las perforaciones de *S* por aristas de  $\Gamma$  etiquetadas con espín  $j_p$ . Nótese que el área está cuantizada (los valores propios de (12) son discretos). La ecuación (12) dice, además, que hay un valor mínimo para el área,  $A_0 = 4\sqrt{3}\pi\gamma\ell_p^2$ , cuyo valor numérico (como el resto de los valores propios) depende del valor que tenga el parámetro de Immirzi  $\gamma$ . Para tener entonces un valor numérico de  $A_0$ , que es de suma importancia pues fija la escala en la que los efectos de geometría cuántica son relevantes, es necesario especificar a  $\gamma$ . Esto se consigue calculando la entropía de un agujero negro con GCL y comparando el resultado (que depende de  $\gamma$  [50-55]) con la expresión de Bekenstein-Hawking,  $S = A/4\ell_p^2$ . En la práctica, los cálculos que se realizan involucran ciertas consideraciones técnicas que, según sean, arrojan valores para  $\gamma$  ligeramente distintos: 0.237 y 0.272 son actualmente los valores más aceptados para el parámetro (ver por ejemplo [56]).

GCL es una propuesta de teoría cuántica de la gravedad no perturbativa e independiente del fondo que, producto de observar la lección *gravedad es geometría*, de Relatividad General, enfatiza la naturaleza cuántica de la geometría y sus consecuencias en regímenes extremos en los que la teoría gravitacional de Einstein no es válida. Entre los logros de GCL está, además de la derivación de la fórmula de Bekenstein-Hawking para la entropía de agujeros negros, el estudio sistemático de la geometría cuántica en el interior de éstos y la remoción de la singularidad (ver por ejemplo [57-69]). La aplicación de GCL a Cosmología ha dado lugar a lo que se conoce como Cosmología Cuántica de Lazos (CCL) [70-76], entre cuyos logros se tiene la predicción de un gran rebote (*Big-Bounce*) como solución a la singularidad cosmológica inicial<sup>28</sup> (*Big-Bang*), así como una propuesta concreta para resolver (por efectos cuánticos propagados) ciertas anomalías en el espectro de potencias de la radiación cósmica del fondo de microondas que tensan al modelo estándar ACDM con las observaciones [56, 78].

No obstante los avances, es importante decir que aun queda mucho por hacer en la construcción de la teoría<sup>29</sup>, así como mucho por hacer *con* la teoría, extrayendo predicciones y explorando sus consecuencias.

### 4. Comentarios finales

Aunque GCL no resulte ser *la última palabra* en la cuantización de la gravedad, es posible que sí sea una especie de 'teoría primitiva' que capture propiedades cuánticas fundamentales del espacio-tiempo y, por consiguiente, signifique un primer paso para acceder a la física que gobierna el mundo gravito-cuántico; esa es la esperanza. Sin embargo, también debe decirse con toda honestidad que GCL podría resultar en un descalabro más. Nada de esto lo podemos saber con certeza ahora. La propuesta tiene que ser

<sup>&</sup>lt;sup>28</sup>En 2001 fue reportado el primer indicio de solución a la singularidad cosmológica [77]; desde entonces el resultado se ha confirmado y refinado a la par del desarrollo de CCL.

<sup>&</sup>lt;sup>29</sup>En el capítulo introductorio de [30], por ejemplo, pueden encontrarse algunas de las preguntas que hoy en día están abiertas.

plena y consistentemente terminada, y someterse entonces a la prueba de la naturaleza, que es por supuesto la que encarta o descarta teorías. Gravedad Cuántica es un problema abierto que ha pasado de generación en generación. Tal vez las generaciones de físicos de este siglo logren, por fin, descubrir las leyes que rigen el mundo en que gravedad y cuántica se encuentran.

El Posgrado en Ciencias Físicas de la UNAM (PCF-UNAM) tiene una amplia oferta de campos de conocimiento, entre ellos está el de "Física de Altas Energías, Física Nuclear, Gravitación y Física Matemática", en el cual se pueden llevar a cabo estudios de maestría y doctorado en Gravedad Cuántica (no sólo GCL) y temas afines, además de en otros interesantes temas de física de frontera.

### Agradecimientos

Agradezco a los organizadores de la XXIX Escuela de Verano en Física de la UNAM, en particular a la Dra. Rocío Jáuregui Renaud y al Dr. José Récamier Angelini, su amable invitación a participar en tan magnífico evento.

#### Referencias

- <sup>1</sup>J. G. Galle, "Account of the Discovery of the Planet of Le Verrire at Berlin", MNRAS **7**, 153 (1846).
- <sup>2</sup>C. Barbieri e I. Bertini, *Fundamentals of Astronomy* (CRC Press. Taylor & Francis Group, LLC, 2021).
- <sup>3</sup>S. Newcomb, Astronomical Papers of the American Ephemeris 1, 472 (1882).
- <sup>4</sup>R. Baum y W. Sheehan, *In Search Of Planet Vulcan: The Ghost In Newton's Clockwork Universe* (Basic Books, 1997).
- <sup>5</sup>A. Einstein, "Zur Elektrodynamik bewegter Körper", Ann. Phys. (Berlin) **17**, 891 (1905).
- <sup>6</sup>A. Einstein, "Die Feldgleichungen der Gravitation", Preuss. Akad. Wiss. Berlin, Sitzber., 844 (1915).
- <sup>7</sup>R. Geroch, *General Relativity from A to B* (The University of Chicago Press, 1981).
- <sup>8</sup>B. F. Schutz, A first course in general relativity (Cambridge University Press, 2009).
- <sup>9</sup>S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology: Principles and Applications of the General Theory of Relativity* (John Wiley & Sons, 1972).
- <sup>10</sup>R. M. Wald, *General Relativity* (The University of Chicago Press, 1984).
- <sup>11</sup>V. Mukhanov, *Physical Foundations of Cosmology* (Cambridge University Press, 2005).
- <sup>12</sup>A. Liddle, An Introduction to Modern Cosmology (John Wiley & Sons, 2003).

- <sup>13</sup>C. Kiefer, *Quantum Gravity*, International Series of Monographs on Physics, 136 (Oxford University Press, 2007).
- <sup>14</sup>M. Gell-Mann, "Questions for the Future", en The Nature of Matter. Wolfson College Lectures 1980, J.H. Mulvey (Ed.). Oxford University Press (1981), págs. 169-186.
- <sup>15</sup>A. Einstein, "N\"aherungsweise Integration der Feldgleichungen der Gravitation", Preuss. Akad. Wiss. Berlin, Sitzber., 688 (1916).
- <sup>16</sup>J. Stachel, "The Early History of Quantum Gravity (1916–1940)", en Black Holes, Gravitational Radiation and the Universe, B.R. Iyer and B. Bhawal (Eds). Kluwer Academic Publisher (1999), págs. 525-534.
- <sup>17</sup>C. Rovelli, "Notes for a Brief History of Quantum Gravity", en Ninth Marcel Grossmann Meeting, V. G. Gurzadyan, R. T. Jantzen and R. Ruffini (Eds.). World Scientific (2002), págs. 742-768.
- <sup>18</sup>S. Carlip, D.W. Chiou, W.T. Ni y R. Woodard, "Quantum gravity: A brief history of ideas and some prospects", en One hundred years of General Relativity. Volume 2 (Cap 20), W.T. Ni (Ed.). World Scientific (2017), págs. 325-347.
- <sup>19</sup>R. Arnowitt, S. Deser y C.W. Misner, "The Dynamics of General Relativity", en Gravitation: An Introduction to Current Research (Cap 7), L. Witten (Ed.). Wiley, New York. (1962), págs. 227-265.
- <sup>20</sup>A. Sen, "Gravity as a spin system", Phys. Lett. B **119**, 89 (1982).
- <sup>21</sup>A. Sen, "Quantum theory of spin 3/2-field in Einstein spaces", Int. J. Theor. Phys. **21**, 1 (1982).
- <sup>22</sup>J. Polchinski, *String Theory. Volume I: An Introduction to the Bosonic String* (Cambridge University Press, 1998).
- <sup>23</sup>J. Polchinski, String Theory. Volume II: Superstring Theory and Beyond (Cambridge University Press, 1998).
- <sup>24</sup>K. Becker, M. Becker y J.H. Schwarz, *String Theory and M-Theory: A Modern Introduction* (Cambridge University Press, 2007).
- <sup>25</sup>S. Carlip, "Is quantum gravity necessary?", Class. Quantum Grav. **25**, 154010 (2008).
- <sup>26</sup>C. Rovelli, *Quantum Gravity* (Cambridge University Press, 2004).
- <sup>27</sup>T. Thiemann, *Modern Canonical Quantum General Relativity* (Cambridge University Press, 2007).
- <sup>28</sup>C. Rovelli y F. Vidotto, *Covariant Loop Quantum Gravity* (Cambridge University Press, 2015).
- <sup>29</sup>R. Gambini y J. Pullin, *A First Course in Loop Quantum Gravity* (Oxford University Press, 2011).
- <sup>30</sup>A. Ashtekar y J. Pullin, eds., *Loop Quantum Gravity: The First 30 Years*, vol. 4, 100 Years of General Relativity (World Scientific, 2017).

- <sup>31</sup>A. Ashtekar y J. Lewandowski, "Background independent quantum gravity: a status report", Class. Quantum Grav. **21**, R53 (2004).
- <sup>32</sup>A. Perez, "Introduction to loop quantum gravity and spin foams", en 2nd International Conference on Fundamental Interactions (sep. de 2004).
- <sup>33</sup>A. Corichi, "Loop quantum geometry: a primer", J. Phys.: Conf. Ser. 24, 1 (2005).
- <sup>34</sup>M. Han, Y. Ma y W. Huang, "Fundamental Structure of Loop Quantum Gravity", Int. J. Mod. Phys. D 16, 1397 (2007).
- <sup>35</sup>C. Rovelli, "Loop Quantum Gravity", Living Rev. Relativity **11**, 5 (2008).
- <sup>36</sup>P. Doná y S. Speziale, "Introductory lectures to loop quantum gravity", en Gravitation: Theory and Experiment, 3rd School on Theoretical Physics (jul. de 2010), págs. 89-140.
- <sup>37</sup>K. Giesel y H. Sahlmann, "From Classical To Quantum Gravity: Introduction to Loop Quantum Gravity", PoS QGQGS2011, ed. por J. Barrett, K. Giesel, F. Hellmann, L. Jonke, T. Krajewski, J. Lewandowski, C. Rovelli, H. Sahlmann y H. Steinacker, 002 (2011).
- <sup>38</sup>A. Ashtekar, "Introduction to Loop Quantum Gravity", arXiv:1201.4598 (2012).
- <sup>39</sup>D.-W. Chiou, "Loop Quantum Gravity", Int. J. Mod. Phys. D **24**, 1530005 (2014).
- <sup>40</sup>A. Ashtekar y E. Bianchi, "A short review of loop quantum gravity", Rep. Prog. Phys. 84, 042001 (2021).
- <sup>41</sup>R. M. Wald, *Quantum Field Theory in Curved Spacetime and Black Hole Thermodynamics* (The University of Chicago Press, 1994).
- <sup>42</sup>A. Ashtekar y A. Magnon, "Quantum fields in curved space-times", Proc. R. Soc. Lond. A, 346 (1975).
- <sup>43</sup>A. Ashtekar y A. Magnon-Ashtekar, "A curiosity concerning the role of coherent states in quantum field theory", Pramana **15**, 107 (1980).
- <sup>44</sup>J. Cortez, G.A. Mena Marugán y J. Velhinho, "Quantum Linear Scalar Fields with Time Dependenr Potentials: Overview and Applications to Cosmology", Mathematics 8, 115 (2020).
- <sup>45</sup>J. Cortez, B. Elizaga Navascués, G.A. Mena Marugán, S. Prado y J.M. Velhinho, "Uniqueness Criteria for the Fock Quantization of Dirac Fields and Applications in Hybrid Loop Quantum Cosmology", Universe 6, 241 (2020).
- <sup>46</sup>A. Corichi, J. Cortez y H. Quevedo, "Schrödinger representation for a scalar field on curved spacetime", Phys. Rev. D 66, 085025 (2002).
- <sup>47</sup>J. Lewandowski, A. Okolow, H. Sahlmann y T. Thiemann, "Uniqueness of diffeomorphism invariant states on holonomy-flux algebras", Commun. Math. Phys. 267, 703 (2006).
- <sup>48</sup>M. Varadarajan, "Towards new background independent representations for loop quantum gravity", Class. Quant. Grav. 25, 105011 (2008).

- <sup>49</sup>J. Cortez, G. A. M. Marugán y J. M. Velhinho, "A Brief Overview of Results about Uniqueness of the Quantization in Cosmology", Universe 7, 299 (2021).
- <sup>50</sup>A. Ashtekar, J. Baez, A. Corichi y K. Krasnov, "Quantum geometry and black hole entropy", Phys. Rev. Lett. **80**, 904 (1998).
- <sup>51</sup>A. Ashtekar, J. C. Baez y K. Krasnov, "Quantum geometry of isolated horizons and black hole entropy", Adv. Theor. Math. Phys. **4**, 1 (2000).
- <sup>52</sup>M. Domagala y J. Lewandowski, "Black hole entropy from quantum geometry", Class. Quant. Grav. **21**, 5233 (2004).
- <sup>53</sup>K. A. Meissner, "Black hole entropy in loop quantum gravity", Class. Quant. Grav. 21, 5245 (2004).
- <sup>54</sup>J. F. Barbero G. y A. Perez, "Quantum Geometry and Black Holes", en *Loop Quantum Gravity: The First 30 Years*, ed. por A. Ashtekar y J. Pullin (WSP, 2017), págs. 241-279.
- <sup>55</sup>A. Perez, "Black Holes in Loop Quantum Gravity", Rept. Prog. Phys. **80**, 126901 (2017).
- <sup>56</sup>A. Ashtekar, B. Gupt y V. Sreenath, "Cosmic Tango Between the Very Small and the Very Large: Addressing CMB Anomalies Through Loop Quantum Cosmology", Front. Astron. Space Sci. 8, 76 (2021).
- <sup>57</sup>L. Modesto, "Loop quantum black hole", Class. Quant. Grav. 23, 5587 (2006).
- <sup>58</sup>A. Ashtekar y M. Bojowald, "Quantum geometry and the Schwarzschild singularity", Class. Quant. Grav. **23**, 391 (2006).
- <sup>59</sup>C. G. Boehmer y K. Vandersloot, "Loop Quantum Dynamics of the Schwarzschild Interior", Phys. Rev. D **76**, 104030 (2007).
- <sup>60</sup>R. Gambini y J. Pullin, "Black holes in loop quantum gravity: The Complete spacetime", Phys. Rev. Lett. **101**, 161301 (2008).
- <sup>61</sup>D.-W. Chiou, "Phenomenological dynamics of loop quantum cosmology in Kantowski-Sachs spacetime", Phys. Rev. D **78**, 044019 (2008).
- <sup>62</sup>D.-W. Chiou, "Phenomenological loop quantum geometry of the Schwarzschild black hole", Phys. Rev. D 78, 064040 (2008).
- <sup>63</sup>L. Modesto, "Black hole interior from loop quantum gravity", Adv. High Energy Phys. **2008**, 459290 (2008).
- <sup>64</sup>R. Gambini, J. Olmedo y J. Pullin, "Quantum black holes in Loop Quantum Gravity", Class. Quant. Grav. **31**, 095009 (2014).
- <sup>65</sup>R. Gambini y J. Pullin, "Loop quantization of the Schwarzschild black hole", Phys. Rev. Lett. **110**, 211301 (2013).
- <sup>66</sup>A. Joe y P. Singh, "Kantowski-Sachs spacetime in loop quantum cosmology: bounds on expansion and shear scalars and the viability of quantization prescriptions", Class. Quant. Grav. **32**, 015009 (2015).

- <sup>67</sup>A. Corichi y P. Singh, "Loop quantization of the Schwarzschild interior revisited", Class. Quant. Grav. **33**, 055006 (2016).
- <sup>68</sup>J. Cortez, W. Cuervo, H. A. Morales-Técotl y J. C. Ruelas, "Effective loop quantum geometry of Schwarzschild interior", Phys. Rev. D **95**, 064041 (2017).
- <sup>69</sup>R. Gambini, J. Olmedo y J. Pullin, "Spherically symmetric loop quantum gravity: analysis of improved dynamics", Class. Quant. Grav. **37**, 205012 (2020).
- <sup>70</sup>A. Ashtekar, M. Bojowald y J. Lewandowski, "Mathematical structure of loop quantum cosmology", Adv. Theor. Math. Phys. 7, 233 (2003).
- <sup>71</sup>M. Bojowald, "Loop Quantum Cosmology", Living Rev. Relativity **11**, 4 (2008).
- <sup>72</sup>A. Ashtekar, "Loop Quantum Cosmology: An Overview", Gen. Rel. Grav. 41, 707 (2009).
- <sup>73</sup>G. A. Mena Marugan, "A Brief Introduction to Loop Quantum Cosmology", AIP Conf. Proc. **1130**, ed. por F. Etayo, M. Fioravanti, R. Santamaría y F. Santos, 89-100 (2009).
- <sup>74</sup>A. Ashtekar y P. Singh, "Loop Quantum Cosmology: A Status Report", Class. Quant. Grav. 28, 213001 (2011).
- <sup>75</sup>K. Banerjee, G. Calcagni y M. Martin-Benito, "Introduction to loop quantum cosmology", SIGMA **8**, 016 (2012).
- <sup>76</sup>I. Agullo y A. Corichi, "Loop Quantum Cosmology", en Springer Handbook of Spacetime, ed. por A. Ashtekar y V. Petkov (2014), págs. 809-839.
- <sup>77</sup>M. Bojowald, "Absence of singularity in loop quantum cosmology", Phys. Rev. Lett. **86**, 5227-5230 (2001).
- <sup>78</sup>A. Ashtekar, B. Gupt, D. Jeong y V. Sreenath, "Alleviating the Tension in the Cosmic Microwave Background using Planck-Scale Physics", Phys. Rev. Lett. **125**, 051302 (2020).

# Hadrons: their structure from low to high energy

#### Aurore Courtoy

#### October 2022

#### Abstract

In this contribution, we summarize lectures on hadron physics given at the "Escuela de Verano 2022," organized by the Instituto de Física and Instituto de Ciencias Físicas of UNAM in June 2022. During the school, we discussed the concept of hadrons, their description in the Standard Model of particles, and the challenges in revealing information about the non-perturbative nature of their interaction. The three lectures were organized as follows: 1) proton, pion, etc, 2) structure: theory, 3) global analyses and fits.

#### Introduction

Hadron physics was born at the frontier between nuclear and particle physics, at times when our understanding of particle physics was reorganized in elegant theories. Nowadays hadron physics is part of the field of Quantum Chromodynamics (QCD), which is the underlying gauge theory of the strong interaction. Yet, as will be briefly discussed in Section 1, the theory is formally described in terms of degrees of freedom of quarks and gluons – the fundamental particles. Hadrons take over at low energies for which the gauge theory cannot be fully appreciated from perturbation theory: quarks and gluons give way to confined states – hadrons.

Exploration of a class of processes, called deep inelastic processes for their characteristic kinematics (see Section 2), revealed the structure of hadrons in terms of the fundamental constituents – quarks and gluons. Pioneer experiments, *e.g.*, at SLAC have been complemented by the important HERA data at higher energies, as well as many experiments at CERN and Fermilab. Nowadays, hadron colliders (such as the *Large Hadron Collider*, LHC) calls for precision and accuracy on the knowledge of hadron structure [1]. Yet, the underlying dynamics responsible for binding quarks and gluons into hadrons is not fully understood. Recently, several dedicated experiments have focused on low energy aspects of hadron structure, such as those taking place at Jefferson Lab, the planned *Electron-Ion Collider* (EIC) [2], or the next COMPASS++ (AMBER) experiment.

The goal of hadron physics practitioners is to understand QCD at the transition where quarks and gluons become bound hadrons. To that aim, studies of the structure of hadrons have been developed to resolve (mathematical and field-theoretical) objects that are sensitive to properties of hadrons. In Section 2 we will review how the distribution of quarks and gluons inside hadrons can reveal hints about, e.g., the proton spin decomposition, mass generation, the role of specific quarks.

This contribution to the proceedings is not aimed to substitute nor to emulate the excellent textbooks on the subject, *e.g.*, [3, 4, 5]. For that very reason, the first two sections will be short and focused to our research interests, with an extended discussion on some modern aspects of analyses of hadron structure in Section 3. For the eventual reader who would like to dive into the formalism of hadron structure, Ref. [6] written as proceeding contributions for an Erice Summer School is a staple in the field.

#### 1 Proton, pion, etc

The word "hadron" comes from the Greek hadrós, which means "thick." Hadrons belong to two categories: mesons, *mesos* or intermediate, and baryons, *barýs* or heavy. Their classification in terms of fundamental particles was made possible thanks to the breakthrough of *The eightfold way* by Gell-Mann, alongside Zweig, and, independently, by Ne'eman. The classification is based on the fact that continuous symmetries could be used to describe the observed spectrum of hadrons in a unified picture. As would become clear in the development of particle physics, Lie groups play an important role, in particular the special unitary groups (SU(n)). Hadrons can be formed as bound states, mesons and baryons with corresponding properties, of entities, called (constituent) quarks, according to the  $SU(n_f)$  symmetry of degree  $n_f = 3$  representing the number of possible values for the newly introduced quantum number of *flavor*. That is, the three quark flavors form a triplet in the sense of group theory. The three values for flavors in the quark model are up, down and strange.<sup>1</sup> Mesons are obtained as combination of a quark and an antiquark, and baryons are made up of three quarks. Quarks, the fundamental entities, are fermions of spin 1/2, and have fractional electric charge; they now also carry flavor and baryon quantum numbers. The baryon number is 1/3 for quarks and -1/3for antiquarks.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Nowadays we know that  $n_f = 6$ : up, down, strange, charm, top and bottom. However the three quark flavors of the original flavor SU(3) correspond to the *light quarks*, and the other three (charm, top and bottom) to *heavy quarks*, what would make an extension to  $SU(n_f > 3)$  more difficult phenomenologically.

Those three flavors were enough to describe the known spectrum of hadrons at the time of its discovery. The symmetry related to spin,  $SU(2)_s$ , was also combined to flavor  $SU(3)_f$  with account for more quantum numbers. This led to the famous SU(6) wave function for the proton,<sup>2</sup>

$$|p\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{18}} [|uud\rangle (|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - 2|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) + |udu\rangle (|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - 2|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) + |duu\rangle (|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - 2|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle)$$
(1)

Quark model was successful as a firststep classification in terms of charge and isospin, and also in explaining the approximate mass hierarchy in hadrons. However, due to Pauli principle among other evidences, an additional quantum number needed to be introduced. That quantum number is associated with the local/gauge symmetry of color  $-SU(3)_c$ . While the same symmetry group was required, the color group is a local or gauge group, *i.e.*, the field transformation under that symmetry will be more restrictive and, in particular, will give rise to the existence of gauge bosons that mediate the interaction. The gauge theory associated to color SU(3) is called Quantum Chromodynamics (QCD) and governs the strong interactions. The gauge bosons of the strong interaction are the gluons.



Figure 1: The strong coupling constant  $\alpha_s(Q^2)$  as a function of the energy resolution Q. Figure from [7].

The specifics of gauge theories are discussed at length in textbooks, such as [8, 9]. A characteristic aspect of gauge theories can be found through the behavior of the corresponding effective coupling. In the case of QCD, the strong coupling constant  $\alpha_s(Q^2)$  exhibits a decrease with increasing probing scales Q, as can be observed in Fig. 1. Namely, the coupling is weaker for short distances, a property called *asymptotic freedom*. The latter property is linked to the nonabelian nature of the SU(3) gauge group that allows gauge fields to interact among themselves: the gauge sector of QCD is responsible for many of the observed behaviors inside hadrons. At resolution scales

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>See, e.g., Chapter 2 of Ref. [3].

for which the strong coupling constant is small, perturbation theory and its typical expansion in powers of  $\alpha_s(Q)/(4\pi)$  converges and, hence, can be used<sup>3</sup>.

On the flip side of the scale dependence, at large distances, the coupling constant grows until becoming very large at a scale  $Q = \Lambda_{\rm QCD}$  around which perturbation theory breaks down. It is the so-called *nonperturbative regime* of QCD, in which degrees of freedom will evolve, and confinement takes place. At such energy scales, nonperturbative dynamics and its manifestations will dictate the behavior of quarks and gluons inside hadrons. Besides the  $SU(3)_c$  gauge symmetry, the Lagrangian of QCD is sensitive to chiral symmetry –a left/right- $SU(n_f)$  symmetry which is intimately related to the presence of mass terms. Chiral symmetry is explicitly broken in the Standard Model due to the small mass of fermion fields. Moreover, a first dynamical breaking of chiral symmetry implies the existence of an isotriplet of pions, the lightest mesons, and is associated to the generation of mass in the QCD sector.<sup>4</sup>

Most of the features of hadron structure are believed to find origin from the interplay between confinement and chiral symmetry. In what follows, we will describe how to identify and unveil tractable properties from scattering data.

### 2 Structure: theory

The existence of quarks was confirmed through *hard and inclusive processes*. The archetype of such a process is deep inelastic scattering (DIS), a process that involves the collision of an electron beam (more generically, a lepton) and a proton target in the particular kinematical regime defined by Bjorken. It is sketched in Fig. 2: the exchanged photon breaks the proton, so that the final state is no longer a proton but rather a product of the inelastic collision, denoted by X. The process, denoted as

$$e^{-}(k) + P(p) \to e^{-}(k') + X(P_X)$$
 (2)

is characterized by a large momentum exchanged with the target:

 $(k'-k)^2 = q^2 = -Q^2$ , with  $Q^2$  the virtuality of the exchanged photon,

and large transferred energy between beam and target,  $\nu = p \cdot q$ . When both  $Q^2$  and  $\nu$  go to infinity, a set of approximations for the collision can be adopted. Yet, the ratio  $x_B = Q^2/2\nu$  is fixed and its values must be comprised between 0 and 1. Bjorken, and Feynman, proposed that, within this regime, the collision would occur elastically between the exchanged photon and point-like constituents of the target, called *partons*.

 $<sup>^{3}</sup>$ It is true up to corrections due to, *e.g.*, the presence of large logarithms.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>The breaking of symmetry is beyond the scope of this contribution to the proceedings. Details can be found in textbooks, e.g., [10]. References for the structure of pions can be found in [11].

This suggested the need for 1) fundamental constituents, 2) a theory that would allow for quasi-free such constituents for large momentum transfers.

In that scenario, the cross section of the constituents with the probe can be evaluated from a known perturbation theory. The remaining unknown is the distribution of the "active" constituent with a given configuration within its parent hadronic target. Such information is encapsulated in parton distribution functions (PDFs). The latter are nonperturbative objects that will allow us to unveil the sought-for properties of quarks at the frontier of perturbative QCD. At leading order, PDFs reflect the dependence on the Bjorken-x variable coming from the probability that a single constituent i scatters carrying a momentum r



Figure 2: Deep inelastic scattering. Figure from [11].

constituent *i* scatters carrying a momentum  $x = x_B$  within a given configuration of the parent hadron. PDFs are universal objects, they are the same for various processes.

At the same time, Bjorken had predicted that, once those distributions of the constituents are known at a high energy scale  $Q^2 > 1 \text{ GeV}^2$ , they would not depend on  $Q^2$ , only on  $x_B$ . Approximate scaling was observed in SLAC data, confirming asymptotic freedom in QCD. Corrections to that scaling nevertheless occur within the framework of perturbative QCD, and predictions about the *evolution* of parton distribution functions w.r.t. the scale  $Q^2$  are well understood.

From that story about how parton distributions enter the game of hadron structure, we understand how they relate the elastic scattering of quasi-free constituents – *partons*– to the global picture of inelastic processes.<sup>5</sup> As nonperturbative objects appearing in the description of observables, *e.g.*, cross sections, PDFs can be accessed through experiments. The determination of PDFs from data will be the subject of Section 3.

Starting from the hadronic state, parton distribution functions are defined from field-theoretical objects, as the Fourier transform of hadronic matrix elements of Dirac projections of currents. For example, the distribution  $f_1(x)$  represents the distribution of unpolarized quarks within an unpolarized hadron – vector current  $\gamma^{\mu}$ –, namely,

$$\frac{1}{2} \int \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda x} \left\langle P | \bar{\psi}(0) \gamma^{\mu} \psi(\lambda n) | P \right\rangle = f_1(x) p^{\mu} + \mathcal{O}(M^2)$$
(3)

where  $\psi(z)$  is the quark field at z in position space (we omit flavor indices and have summed over spin indices). M is the mass of the hadron.

 $<sup>^5\</sup>mathrm{This}$  description is formalized by the factorization theorems, which are beyond the scope of this contribution.

Some constraints can be derived directly from the field-theoretical definition of distribution functions. Such constraints are referred to as *first-principle* based constraints, as they rely on general arguments such as Lorentz invariance or conservation laws. The behavior of, *e.g.*,  $f_1$  as a function of x is guided by the following arguments:

- the support in x: the PDF is defined on  $x \in [0, 1]$ ;
- distribution functions for valence quarks must vanish for  $x \to 0$  and  $x \to 1$ ; they vanish at  $x \to 1$  for the sea-quark and gluon distributions;
- the positivity of cross sections will constrain the PDF space;
- positivity constraints for polarized PDF follow the previous point.

The moments of distribution functions are constrained by conservation laws through sum rules:

- the valence sum rule renders the number density of valence quarks, *e.g.*,  $\int_0^1 dx f_1^{u_{V/P}}(x) = 2;$
- the momentum sum rule ensures momentum conservation among all constituents: for  $i \in$  the hadronic state,  $\sum_i \int_0^1 dx \, x \, f_1^{i/P}(x) = 1$ .

Such integral constraints imply conditions on the integrability of some combinations of PDF flavors.

To evaluate the PDF  $f_1(x)$ , the hadronic state  $|P\rangle$  has to be modeled, involving modeling of the quark field accordingly. Since the introduction of structure functions and PDFs, many models have been used to give hints about their possible behavior as functions of the variable x. Models for the proton require confinement to be mimicked, while for pion states in Eq. (3) chiral symmetry must be inherent to the model or effective field theory. Pioneer works in that direction show, for the MIT bag model [13], a maximum in the distribution at the momentum fraction x = 1/3, *i.e.*, each of the



Figure 3: PDF  $f_1(x)$  for the flavor up evaluated in the MIT bag model with corrections to restore translation invariance (red curve). The dotted blue curve represents the projection of a 5-dimensional function for a specific spin-intrinsic momentum configuration. Figure from [12].

three valence quarks of the proton takes 1/3 of the proton's momentum, as can be appreciated in Fig. 3. For chiral models of the pion, the distribution is found to be equal for all momentum fractions, implying that there is no preference for a given value of the value x for the quark that interacts with the probe [14]. This feature is understood as a consequence of the breaking of chiral symmetry, and the resulting generation of mass for the constituent quarks. This observation is still scrutinized nowadays and will be briefly discussed in the next Section.

## 3 Global analyses

The evaluation of parton distributions from models is insightful, as they propose (dynamical) origins of manifestations of nonperturbative QCD that could be traced back from the behavior of distribution functions. However, nonperturbative models aim to mirror key characteristics of QCD at a low-energy scale  $\mu_0 < 1$  GeV.<sup>6</sup>

To faithfully determine distribution functions for their further use, say, for predictions at high energies such as those that take place at the LHC, we need to resort to (global) analyses of distribution functions in perturbative QCD. From those analyses, the distribution functions are extracted by comparing the data for many observables  $O_{\rm exp}$  to theoretical expressions for



Figure 4: Sketch of the pion-induced Drell-Yan process.

these observables  $O_{\text{theo}}$ , in which distribution functions are parametrized.<sup>7</sup> The shape of PDF is found by minimizing an objective function, *e.g.*, the chi square  $\chi^2$ , which is its simplest case is constructed as

$$\chi^{2} = \sum_{i \in d.o.f.} \frac{\left[O_{\exp,i}(\{y_{i}\}) - O_{\text{theo},i}(\{y_{i}\};\{\alpha_{n}\})\right]^{2}}{\left(\Delta O_{\exp,i}\right)^{2}}.$$
(4)

 $\Delta O_{\text{exp}}$  accounts for uncorrelated experimental uncertainties  $\Delta O_{\text{exp}}$ . Other penalties can modify the definition given in Eq. (4): the objective function must be adapted to the specifics of each problem. A crucial and non-trivial task follows: the estimation of the uncertainties on the shape of the parametrization that will be found.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>References and details about how to define and move from the hadronic scale  $\mu_0$  can be found in Ref. [11, 15].

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>As expressed by a set of parameters  $\{\alpha_n\}$ .

The proton PDF  $f_1(x)$  defined in Eq. (3) is a well-established quantity, whose determination in global analyses reflects a sophisticated interplay between data, theory and statistics [16]. Those analyses are carried out by collaborations of theorists and phenomenologists, and are constantly expanding in the theoretical and statistical aspects.

During the lectures, we have discussed the guidelines to "guess" a good parametrization for the distribution functions based on the previous Sections. Let us take a toy example to illustrate some points of global analyses. We have (very briefly) played with the structure function of the pion extracted by the E615 collaboration [17]. At the time of the analysis, in 1989, the experimental collaboration proposed its own determination of the pion and nucleon structure functions from the pion-induced Drell-Yan off tungsten target. The Drell-Yan process involves two initial hadrons, scattering to give a photon or Z boson that will decay into a lepton pair, as depicted in Fig. 4,

$$\pi^{-}(P_1) + N(P_2) \to \mu^{-}\mu^{+}(Q^2) + X(P_X).$$

Hence the cross section for this process will involve two PDFs, one for each hadron. In the case of the pion-induced Drell-Yan process, it can be expressed as, to leading order,



Figure 5: E615 projections for the valence PDF of the pion. Warning: those are not data, but rather the binned output of the global analysis performed by the authors of [17].

$$\frac{d^2\sigma}{dx_{\pi}dx_N} = \frac{4\pi\alpha^2}{9s} \frac{[F_{\pi}^v(x_{\pi})G_N(x_N) + F_{\pi}^s(x_{\pi})H_N(x_N)]}{(x_{\pi}x_N)^2}$$

where  $x_{\pi,N}$  denotes the fraction of momentum carried by the active quark of the pion and the tungsten, respectively. Those momentum fractions follow the kinematic relation  $x_{\pi}x_N = Q^2/(2P_1 \cdot P_2)$ . The PDFs for the pion,  $F_{\pi} = x_{\pi}f_{\pi}$ , are classified into the contributions coming from the valence sector,  $f_{\pi}^v$ , and the sea,  $f_{\pi}^s$ . For the negative pion of the E615 experiment, the valence quarks are the down, v = d, and the anti-up,  $v = \bar{u}$ . The  $G/H_N$  functions are relevant combinations of valence and sea PDFs for the nucleons in a nuclear target.

In the original paper, the analysis was conducted at leading order, taking into account corrections from the perturbative dependence on  $Q^2$  in QCD. We will focus on the parametrization of the valence PDF of the pion. As explained in Section 2, PDFs for valence quarks vanish for  $x \to 0$  and  $x \to 1$ , they are defined between x = 0 and x = 1, and are integrable, as they are constrained by the valence and the momentum sum rules. An educated guess from those mathematical properties readily suggests to use a form like,

$$|xf_1^v(x_\pi)|_0 = A x^{\alpha} (1-x)^{\beta}$$

where  $(\alpha, \beta)$  are initially limited to values allowing for integrability. The parameter A is constrained by the valence sum rule:

$$\int_{0}^{1} dx f_{1}^{v}(x_{\pi}) = 1$$

$$\Leftrightarrow A \int_{0}^{1} dx x^{\alpha - 1} (1 - x)^{\beta} = 1$$

$$\Leftrightarrow A = B(\alpha, \beta + 1)^{-1}$$
(5)

with B(a, b) the Euler beta function. Beyond predictions from nonpertubative models, early QCD predictions might have a constraining power to be taken into account discerningly. Examples of such predictions are given by the quark counting rules (predicted by Brodsky and collaborators in the 70s) which constrain the falloff of PDFs in the limit  $x \to 1$ , but also prediction for the small-x behavior, the finiteness of some ratios of flavors, etc. In particular, the quark counting rules tell us that the x-shape of PDFs in the limit  $x \to 1$  reflects the behavior of the spectators, carrying a (1-x) fraction of the hadron momentum. On the other side of the physical x range, the small-x behavior is driven by different physics scenarios.

In Eq. (3), a correction to the leading PDF  $f_1$  arises from a contribution of order  $M^2$ . It will become important for scales for which  $M^2/Q^2 \leq 1$ . For the E615 experiment, such corrections are small, as 4.05 < Q < 8.55 GeV. They were nevertheless considered in Ref. [17] for consistency of approximations, especially in the large-x region. The second iteration on the parametrization of our interest reads

$$xf_1^v(x_\pi)|_1 = A \left[ x^{\alpha}(1-x)^{\beta} + \gamma \frac{M^2}{Q^2} \frac{2x_\pi^2}{9} \right],$$
(6)

where we take M = 1 GeV to be consistent with the numbers reported in Ref. [17]. The normalization A now slightly differs from the analytical result of Eq. (5).

Let us now examine and play with the projected value for the pion structure functions obtained with  $xf_1^v(x_\pi)|_1$ , depicted in Fig. 5. We would like to emphasize that the points in that figure are not data: they represent the tabulated output of the global analysis of both the pion and nucleon structure functions within a set of approximations of the original paper by the E615 collaboration. As a first exercise, we can evaluate the set of parameters  $(\alpha, \beta, \gamma)$  by minimizing the functional form, Eq. (6), against the value of the red points in Fig. 5. This can be done, *e.g.*, using the NonlinearModelFit function in Mathematica. Notice that the objective function for that option is the  $L_2$  distance, *i.e.*, it does not take the experimental uncertainties into account by default. The latter can be passed as weights of  $1/\Delta O_{exp}^2$ in the NonlinearModelFit function. One can also define the  $\chi^2$  function (4) and minimize it with respect to the parameters with FindMinimum. The latter option is closer to what is actually done in global analyses, but all options to display the statistical quantities, such as standard errors, covariance matrix,  $\cdots$ , will have to be introduced by hand, as opposed to the convenient NonlinearModelFit function.

With both methods, the central values that we find agree with the original paper. The value of the  $\chi^2$  is about 20, corresponding to reduced chi square  $\chi^2/d.o.f. = 0.5$ , which is too good – as expected by the nature of our exercise. The E615 analysis finds a reduced  $\chi^2$  of about 1. Similarly, as it can be expected, the determination of the uncertainties on the parameters cannot be meaningfully performed from the projected errors. In Table 1, we quote the central values (central column, *Estimate*) and the corresponding uncertainties (right column, *Standard Error*) obtained with the NonlinearModelFit function. The latter are artificially small. We nevertheless quote them for further illustrative purposes.

In Fig. 6, we compare the projected results of [17] with the expression for  $xf_1^v(x_\pi)|_1$  with the best-fit parameters of Table 1. On the right panel, we also display the propagation of the uncertainties. This is achieved by applying the formula,

$$\Delta\left(f_1^v(x_{\pi};\{\alpha_n\})\right) = \sqrt{\sum_{i,j\in n} \frac{\partial f_1^v(x_{\pi};\{\alpha_n\})}{\partial(\alpha_n)_i} \operatorname{cov}_{ij} \frac{\partial f_1^v(x_{\pi};\{\alpha_n\})}{\partial(\alpha_n)_j}}$$
(7)

for uncertainties based on the Hessian matrix – the Hessian matrix is the inverse of the covariance matrix cov. In the above formula, we have explicitly displayed the dependence on the set of parameters  $\{\alpha_n\}$ . The small size of the error band on the right panel of Fig. 6 is an artifact of our exercise, it should not be taken for granted: the red error bands reflect the true uncertainties of the original analysis.

	Estimate	Standard Error
$\alpha$	0.613	0.011
$\beta$	1.268	0.029
$\gamma$	0.960	0.251

Table 1: Parameters obtained in Mathematica from the inspection of the functional form against the projected results for the valence structure function of the pion of Ref. [17].



Figure 6: Projection of the valence PDF of the pion compared to the central value obtained using Eq. (6) (left), and compared to the error band obtained from the Hessian propagation of the uncertainties quoted in Table 1 (right).

A few observations can be made from Fig. 6. The uncertainty virtually cancels in the region in which there is no data. The uncertainty slightly increases at  $x \to 1$ . Let us first explain the latter observation. The presence of the *higher-twist* corrections in Eq. (6) is in contradiction with a vanishing PDF at x = 1. The authors of the the E615 analysis found that the fit is not crucial improved by that term, yet it will influence the result of our *posterior* examination, see Table 1. We show the central value of the  $M^2/Q^2$  correction, second term in Eq. (6), in green in Fig. 7.

As for the narrow uncertainty in the smallx region, it results from a lack of flexibility of the parametrization, Eq. (6), in a region that is unconstrained by data. This effect is well-known by practitioners. Various improvements of the methodology can be adopted to



Figure 7: E615 projections for the valence PDF of the pion compared to the higher-twist correction, second term in the parametrization Eq. (6).

approach the problem. We will spend the rest of this Section discussing this state of affairs.

The first step towards improving unrealistic uncertainties consists in opting for a more flexible functional form while keeping the number of free parameters low to avoid overfitting.<sup>8</sup> Another step involves choosing more than one single parametrization, and hence explore more solutions in the space of parameters. The latter procedure is currently adopted in global analyses for the proton PDF  $f_1(x)$ , e.g., in Ref. [18].<sup>9</sup>

As described above, the Standard Errors are estimated from the behavior of the  $\chi^2$  function as the value of a parameter  $\{\alpha_n\}$  varies. It is sketched in Fig. 8 for made-up numbers that are unrelated to the pion PDF. Usually,  $1\sigma$  uncertainties corresponds to the variation  $\Delta \alpha_i \equiv$  $\alpha_i - (\alpha_i)_{\text{best fit}}$  necessary to obtain a variation of one unit in  $\chi^2$  – with all other parameters fixed.<sup>10</sup> This is the  $\Delta\chi^2 = 1$ standard, illustrated by the shorter light blue double arrow " $1\sigma \rightarrow T^2 = 1$ " in Fig. 8. Multiple studies have shown that the " $\Delta \chi^2 = 1$  rule" may be too restrictive when accounting for the various sources of uncertainties of a fitting methodology. It is no longer used in many global analyses that rely on the propagation of the uncertainty of the parameters. Instead, a differ-



Figure 8: Sketch of the  $\Delta \chi^2 = \chi^2 - \chi_0^2$  as a function of the theoretical unknown  $f(\{\alpha_n\})$ . See text for details.

ent criterion for the value of  $\Delta \chi^2 \gg 1$  is adopted at  $1\sigma$ . It is illustrated in Fig. 8 for the case " $\Delta \chi^2 = T^2 = 4$ " and the resulting  $1\sigma$  uncertainty  $\Delta f(\Delta \chi^2 = 4)$ . This prescription can, in part, be justified by the (almost) unlimited possible choice of parametrizations that follow the guidelines explained in Section 2. Up to date, no global analysis of the pion PDF considers a  $\Delta \chi^2 > 1$  prescription at  $1\sigma^{11}$ . Hence, we do not illustrate this method for the valence PDF of the pion in the present contribution.

An alternative solution to circumvent the narrowing of the error bands at small xis called "resampling." It consists in taking N replicas of the data distributed normally within their (assumed) Gaussian uncertainties. The number N of such replicas is cho-

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>Criterion for goodness-of-fit are important, but they are beyond the scope of our exercise. A review for PDF practitioners can be found in Ref. [16].

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>And, to a lower extent, in analyses of polarized proton PDFs, e.g., [19].

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup>Details about this criterion can be found in, *e.g.*, Ref. [20]. <sup>11</sup>The xFitter analysis [21] quotes the  $\Delta \chi^2 = 1$  uncertainties.



Figure 9:  $N_{exo} = 20$  replicas of the projected structure functions (left), and compared to the  $N_{exo} = 20$  fits of the replicas (right).

sen to reproduce the distribution of the original data, *i.e.*, mainly the mean and the deviations. In the present exercise, we take a small number  $N_{exo} = 20$  of resampled red points, with  $N_{exo}$  far from the ideal value N of replicas. They are displayed in multicolored schemes in Fig. 9.

Then, we perform the fit described in previous paragraphs  $N_{exo}$  times using the parametrization (6). The results are plotted in light blue in the right panel of Fig. 9. A prescription to quote the corresponding uncertainties is simply to take the central X% replicas for the object of interest, with  $X = 68, 90, 95, \cdots$  according to the desired confidence level. From the right panel of Fig. 9, it can be observed that the fitted replicas lead to a larger span of parameter values for  $\alpha$ . This trend can only be confirmed by performing the full analysis with N replicas and taking the 1 or  $2\sigma$  central distributions. Up to date, there is one global analysis of the valence structure function of the pion whose methodology is based on "Monte Carlo" replicas [22].

Let us now analyze the outcome of our simple exercise. We have used the results of the analysis of the E615 data as a toy example. On the basis of this projected/discretized result, we have examined the choice of parametrization and the propagation of uncertainty, *a posteriori*. We have shown that the magnitude of uncertainty reflects the experimental errors and the methodological choices, but also the physics approximations (though not considered here). The need for  $M^2/Q^2$  corrections at large- $x_{\pi}$  values is not conclusively established from the simplistic exercise. Recent global analyses of the pion PDF have been performed, including updated corrections [21, 23]. To move beyond these considerations, we might want to go back to our initial concern of extracting information about hadrons from the results of global analyses. Since global analyses propose a parametrization of the pion PDF, can we compare it with predictions for nonperturbative hadronic matrix elements and infer conclusions?

First, it must be noted that a key ingredient of perturbative QCD was not fully considered in the above exercise, *i.e.* the dependence of the PDFs on the scale  $Q^2$  that originates from the violation of Bjorken scaling. Specifically, the parametrization form (6) corresponds to a low initial scale  $Q_0^2$ , at which perturbative QCD is turned on: quarks emit gluons, which in turn emit quark pairs, and



Figure 10: The pion PDF evaluated in the Nambu–Jona-Lasinio model: solid black and dashed red curves are obtained after evolution to leading and next-to-leading order, respectively. Figure from [11], courtesy of S. Noguera.

so on, with increasing energy, Q. More often than not, the characteristic scale  $\mu_0$  of a nonperturbative model is much lower than  $Q_0$ , tentatively close to  $\Lambda_{\rm QCD}$ , where the coupling constant becomes very large. For practical reasons, model's evaluations have been brought to scales available in global analyses by pushing the limits of perturbative QCD for  $Q \gtrsim \Lambda_{QCD}$ .

An example is shown in Fig. 10, where the valence PDF of the pion from E615 analysis is compared to the pion PDF in the Nambu–Jona-Lasinio model. As explained in Section 2,  $f_{1,NJL}^v(x_{\pi}, \mu_0) = 1$ . From that result, one can estimate the effects of gluon and pair emissions up to the scale corresponding to the E615 experiment. The results are evolved to be compared to the projected structure function [11]. Such comparisons abound in literature, yet there is no one-to-one connection between a PDF obtained in a model and its determination from global analysis. A quick look at Fig. 10 would make one conclude that, indeed, the E615 result agrees with a broad pion PDF which origins are found in a model for the pion as a bound-state of constituent quarks. The model, however, does not predict the behavior that would be expected from quark counting rules at large x. For the valence contribution of the pion PDF, considerations about the number of spectators and helicity conservation predict a  $(1 - x)^2$  falloff. Since the field-theoretical definitions of distribution functions differ between a model and QCD, conclusions cannot be drawn.

There is an even stronger argument that obscures direct comparison of shapes in x. As infinitely many parametrizations are equivalently good, there will exist redundant ones. Mathematical properties of polynomials used for flexible parametrizations of PDFs forbid to pin down the exact power  $(1 - x)^{\beta}$  of Eq. (6) in certain limits, unless precise data are available. This argument is called *functional mimicry* [24].

Interestingly, so far, all global analyses of the valence PDF of the pion (except one) agree with a power-law falloff of  $(1 - x)^{\beta=1}$ . This discrepancy with the early-QCD expectation is readily justified through the concept of mimicry. Yet, further studies will need to be done to explore more of the pion PDF.

In our example, we have chosen to analyze the pion PDF, as the results of the E615 analysis are available in a simple form [17]. However, the proton PDFs –in particular, the unpolarized  $f_1(x)$ – are examples of the state-of-the-art in QCD global analyses. All of the above has been considered to an exponentiated level of sophistication. We invite the interested readers to consult, *e.g.*, Ref. [16] for a detailed review.

## 4 Conclusions

In this contribution to the proceedings of the "Escuela de Verano del ICF y IF-UNAM, 2022," we have reviewed phenomenological aspects of the structure of hadrons.

After two brief sections on hadron physics that led to the definition of parton distribution functions (PDFs), we have highlighted the role of global analyses in determining the properties of hadrons. To do so, we have used a toy example: the valence PDF of the pion obtained from the E615 data on pion-induced Drell-Yan.

In that toy example, helpful concepts of statistics were introduced, such as the chisquare function, propagation of uncertainties, and resampling. We have explored some of the methods and techniques that are commonly used to estimate the uncertainties. Finally, in concluding remarks, we presented an interpretation of the PDF sets obtained thanks to global analyses. While there is no one-to-one correspondence with low-energy models, the community's increasing interest is reflected through constant efforts to unify both the nonperturbative and the perturbative pictures. Phenomenological improvements include corrections such, as higher-twist contributions or nuclear effects. The analysis of recent mid-energy data and future experiments will bring a new light to our knowledge on hadron structure.

## Acknowledgments

A.C. is grateful to P. Nadolsky for fruitful discussions as well as to M. Ponce Chávez and L. Kotz for proofreading of the manuscript. The author is supported by the UNAM Grant No. DGAPA-PAPIIT IN111222, German-Mexican research collaboration grant SP 778/4-1 (DFG) and 278017 (CONACYT) and CONACyT – Ciencia de Frontera 2019 No. 51244 (FORDECYT-PRONACES).

#### References

- PDF4LHC Working Group Collaboration, R. D. Ball *et al.*, "The PDF4LHC21 combination of global PDF fits for the LHC Run III," *J. Phys. G* 49 no. 8, (2022) 080501, arXiv:2203.05506 [hep-ph].
- R. Abdul Khalek *et al.*, "Science Requirements and Detector Concepts for the Electron-Ion Collider: EIC Yellow Report," *Nucl. Phys. A* 1026 (2022) 122447, arXiv:2103.05419 [physics.ins-det].
- [3] F. Halzen and A. D. Martin, QUARKS AND LEPTONS: AN INTRODUCTORY COURSE IN MODERN PARTICLE PHYSICS. 1984.
- [4] F. E. Close, An Introduction to Quarks and Partons. 1979.
- [5] R. G. Roberts, *The Structure of the proton: Deep inelastic scattering*. Cambridge Monographs on Mathematical Physics. Cambridge University Press, 2, 1994.
- [6] R. L. Jaffe, "Spin, twist and hadron structure in deep inelastic processes," in Ettore Majorana International School of Nucleon Structure: 1st Course: The Spin Structure of the Nucleon, pp. 42–129. 1, 1996. arXiv:hep-ph/9602236.
- [7] Particle Data Group Collaboration, R. L. Workman, "Review of Particle Physics," PTEP 2022 (2022) 083C01.
- [8] I. J. R. Aitchison and A. J. G. Hey, Gauge Theories in Particle Physics: A Practical Introduction, Volume 1 : From Relativistic Quantum Mechanics to QED, Fourth Edition. Taylor & Francis, 2013.
- [9] I. J. R. Aitchison and A. J. G. Hey, Gauge Theories in Particle Physics: A Practical Introduction, Volume 2: Non-Abelian Gauge Theories : QCD and The Electroweak Theory, Fourth Edition. Taylor & Francis, 2013.
- [10] M. D. Schwartz, Quantum Field Theory and the Standard Model. Cambridge University Press, 3, 2014.
- [11] A. Courtoy, Generalized Parton Distributions of Pions. Spin Structure of Hadrons. Phd thesis, October, 2009. arXiv:1010.2974 [hep-ph].

- [12] A. Courtoy and A. S. Miramontes, "Quark Orbital Angular Momentum in the MIT Bag Model," Phys. Rev. D 95 no. 1, (2017) 014027, arXiv:1611.03375 [hep-ph].
- [13] R. L. Jaffe, "Deep Inelastic Structure Functions in an Approximation to the Bag Theory," Phys. Rev. D 11 (1975) 1953.
- [14] R. M. Davidson and E. Ruiz Arriola, "Parton distributions functions of pion, kaon and eta pseudoscalar mesons in the NJL model," Acta Phys. Polon. B 33 (2002) 1791–1808, arXiv:hep-ph/0110291.
- [15] A. Courtoy, S. Scopetta, and V. Vento, "Non-perturbative momentum dependence of the coupling constant and hadronic models," *Eur. Phys. J. A* 47 (2011) 49, arXiv:1102.1599 [hep-ph].
- K. Kovařík, P. M. Nadolsky, and D. E. Soper, "Hadronic structure in high-energy collisions," *Rev. Mod. Phys.* 92 no. 4, (2020) 045003, arXiv:1905.06957 [hep-ph].
- [17] J. S. Conway *et al.*, "Experimental Study of Muon Pairs Produced by 252-GeV Pions on Tungsten," *Phys. Rev. D* **39** (1989) 92–122.
- [18] T.-J. Hou et al., "New CTEQ global analysis of quantum chromodynamics with high-precision data from the LHC," Phys. Rev. D 103 no. 1, (2021) 014013, arXiv:1912.10053 [hep-ph].
- [19] J. Benel, A. Courtoy, and R. Ferro-Hernandez, "A constrained fit of the valence transversity distributions from dihadron production," *Eur. Phys. J. C* 80 no. 5, (2020) 465, arXiv:1912.03289 [hep-ph].
- [20] P. Bevington and D. K. Robinson, Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences. 2003.
- [21] I. Novikov et al., "Parton Distribution Functions of the Charged Pion Within The xFitter Framework," Phys. Rev. D 102 no. 1, (2020) 014040, arXiv:2002.02902 [hep-ph].
- [22] P. C. Barry, N. Sato, W. Melnitchouk, and C.-R. Ji, "First Monte Carlo Global QCD Analysis of Pion Parton Distributions," *Phys. Rev. Lett.* **121** no. 15, (2018) 152001, arXiv:1804.01965 [hep-ph].
- [23] Jefferson Lab Angular Momentum (JAM) Collaboration, P. C. Barry, C.-R. Ji, N. Sato, and W. Melnitchouk, "Global QCD Analysis of Pion Parton

Distributions with Threshold Resummation," *Phys. Rev. Lett.* **127** no. 23, (2021) 232001, arXiv:2108.05822 [hep-ph].

[24] A. Courtoy and P. M. Nadolsky, "Testing momentum dependence of the nonperturbative hadron structure in a global QCD analysis," *Phys. Rev. D* 103 no. 5, (2021) 054029, arXiv:2011.10078 [hep-ph].

# Moléculas exóticas de Rydberg

Rocío Jáuregui y Homar Rivera

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

## 1 Introducción

Las moléculas exóticas de Rydberg también conocidas como moléculas de Rydberg de largo alcance (LRRM por sus siglas en inglés) resultan de la interacción atractiva de un electrón altamente excitado de un átomo de Rydberg hacia uno o más átomos en estado fundamental. Las características generales de las LRRM se pueden describir correctamente en términos de un novedoso mecanismo de enlace químico, enmarcado en el modelo de pseudopotencial de Fermi [1] para la dispersión vía ondas s [2] y ondas p[3, 4]. En este contexo, se les considera un escenario único para el estudio de la física de dispersiones a ultra bajas energías.

Las moléculas exóticas de Rydberg presentan enormes longitudes de enlace que además son ajustables: su tamaño es similar al de los átomos de Rydberg y sus energías de enlace son particularmente débiles. Así mismo, como el electrón de Rydberg está extremadamente localizado cerca del átomo perturbador, la separación de carga resultante produce momentos dipolares eléctricos permanentes incluso para LRRM homonucleares. Estas sorprendentes propiedades ya han sido verificadas en Rb [5, 6, 7, 8, 9], Cs [10, 11] y Sr [12].

El propósito de estas notas es hacer una muy breve dscripción tanto de los átomos de Rydberg como de las moléculas exóticas de Rydberg.

# 2 Átomos de Rydberg.

Un átomo de Rydberg se caracteriza por tener uno o más electrones en un estado altamente excitado. En consecuencia, un electrón de Rydberg orbita a grandes distancias del carozo y su comportamiento es semejante al de un electrón en un átomo hidrogenoide siendo sus números cuánticos el número principal n, el entero que caracteriza la magnitud del momento angular orbital  $\ell$ , su proyección a lo largo de un eje  $m_{\ell}$  y finalmente la proyección de su espín  $m_s$ . Es decir, un orbital de Rydberg tiene la estructura

$$\phi_{n\ell m_{\ell}m_s}(\vec{r}) = \frac{f_{n\ell}(r)}{r} Y_{\ell m_{\ell}}(\theta,\varphi) \chi_{m_s},\tag{1}$$

con  $Y_{\ell m_{\ell}}$  el armónico esférico. Como es usual, el acoplamiento de momentos orbital y de espín conduce al momento angular total  $\vec{j}$ , cuya magnitud y proyección sobre un eje  $m_j$  serán entonces buenos números cuánticos. Tomando en cuenta que el carozo atómico tiene una distribución de carga diferente a la del protón, para la descripción de orbitales de Rydberg se introducen parámetros conocidos como defectos cuánticos [13]

cuya función es encapsular las diferencias electrónicas entre un átomo de Rydberg y un átomo de hidrógeno. Así, en unidades atómicas, la energía interna de un átomo alcalino cuyo electrón de valencia está altamente excitado se describe por la ecuación

$$E_{n\ell} = -\frac{1}{2} \frac{1}{(n - \mu_{\ell}(n))^2} \equiv -\frac{1}{2} \frac{1}{\nu_{n\ell}^2}.$$
(2)

La dependencia en  $\ell$  del defecto cuantico  $\mu_{\ell}(n)$  se puede entender en un contexto semiclásico considerando que la órbitas asociadas a estados con bajo momento angular  $\ell$  son más elípticas que las órbitas de estados de alto momento angular. Por lo que, en los estados de bajo  $\ell$ , el electrón pasa más tiempo cerca del carozo y como consecuencia la corrección a la energía respecto al esquema de átomo de hidrógeno será mayor en comparación con las espectativas para valores mayores de  $\ell$ . Los defectos cuánticos suelen obtenerse mediante el ajuste a los niveles de energía medidos experimentalmente. Una descripción meramente teórica implica modelar al potencial asociado al carozo de Rydberg [14]. Este potencial es esencialmente de Coulomb para distancias grandes al carozo lo que permite reproducir aproximadamente a las funciones de onda electrónicas en esa región con funciones hidrogenoides tipo Whittaker

$$f_{n\ell}(r) = \frac{1}{r} \frac{W_{\nu_{n\ell},\ell+1/2}(2r/\nu)}{\sqrt{\nu^2 \Gamma(\nu+\ell+1)\Gamma(\nu-\ell)}}.$$
(3)

Los electrones de Rydberg están débilmente ligados al carozo positivo y los átomos de Rydberg son muy sensibles a perturbaciones, e. g., campos electromagéticos externos o la cercanía a otros sistemas atómicos [15].

Algunas de sus propiedades de escalamiento con el número cuántico principal para el caso de átomos alcalinos se presentan en la Tabla I.

Table 1: Escalamiento para algunos átomos alcalinos de Rydberg con el número cuántico principal.

Propiedad	Escalamiento	Rb-Kr(5s)	Rb-Kr(43s)
Energía de enlace	$n^{-2}$	4.18 eV	8.56  meV
Radio de la orbita	$n^2$	$5.63 \ a_0$	$2384.2 \ a_0$
Vida media	$n^3$	26.2  ns	$42.3 \ \mu s$
$C_6$	$n^{11}$	$4707 \mathrm{~au}$	$-1.697 \times 10^{19}$ au
< 5p er ns >	$n^{-1.5}$	$4.23 e a_0$	$0.0103 \ ea_0$
< np er (n+1)s >	$n^2$	-	$1069 e a_0$

#### 3 Interacción entre átomos de Rydberg

Los átomos de Rydberg interactúan fuertemente entre sí, debido a la magnitud no despreciable de elementos de matriz del momento dipolar eléctrico. En principio hay dos tipos de potenciales que pueden utilizarse para describir esta interacción, el dipolo-dipolo que decae con la distancia entre los núcleos de los dos átomos R como  $R^3$ , o el potencial de Van der Waals que decae como  $R^6$ . Si en la descripción en la que los átomos están muy separados  $R \to \infty$ , la diferencia entre la suma de las energías internas de cada átomo de Rydberg es distinta de cero, la interacción adecuada es la de Van der Waals. Si por el contrario, existen dos pares de estados asintóticos en que esa diferencia es nula, la opción dipolo-dipolo es la adecuada. Se dice entonces que el sistema posee una resonancia de Förster [17].

Los factores de escalamiento de la Tabla 1 sugieren que la interacción de Van der Waals depende del número cuántico principal con un exponente alto, de hecho  $n^{11}$ . La interacción entre átomos de Rydberg fue observada originalmente como el ensanchamiento de líneas espectrales en Ref. [18].

#### 3.1 Bloqueo de Rydberg

Dada la interacción intensa que ocurre entre dos átomos de Rydberg, tiene lugar el llamado bloqueo de Rydberg. Sea  $\hbar\omega$  la energía de excitación entre el estado base  $|g\rangle$ y un estado de Rydberg  $|r\rangle$  de interés, en el caso de un átomo aislado. La presencia de otro átomo de Rydberg alterará significativamente a  $\omega$  de tal suerte que un láser de frecuencia  $\omega$  puede inducir la transición electrónica  $|g\rangle \rightarrow |r\rangle$  sólo si no hay ningún otro átomo de Rydberg cercano. Este bloqueo a la formación de átomos de Rydberg permite crear estados entrelazados de un par de átomos,  $I \to II$ , con estructura

$$c_{gg}|g\rangle_I|g\rangle_{II} + c_{rg}|r\rangle_I|g\rangle_{II} + c_{gr}|g\rangle_I|r\rangle_{II} \tag{4}$$

y coeficientes controlables con la intensidad y tiempos de aplicación de los láseres y, por supuesto, la densidad de átomos. A la distancia necesaria para que ya no sea factible la doble excitación electrónica de un par de átomos se le llama radio de bloqueo. Efectos coherentes asociados al bloqueo de Rydberg se reportan en Ref. [19, 20]. Este fenómeno se considera potencialmente útil para realizar procesos de interés en Información Cuántica. Algunos adelantos se detallan en Ref. [22, 23, 24]. Una presentación amigable de metodologías para el cálculo del bloqueo de Rydberg puede encontrarse en la Ref. [21]

# 4 Interacción de un átomo de Rydberg con un átomo en su estado base.

Cuando un átomo de Rydberg se sitúa en la vecindad de un átomo en estado base, la interacción entre ambos proviene mayormente de la dispersión del electrón de Rydberg por el átomo en el estado base. Fermi [1] fue el primero en estudiar teóricamente este sistema al tratar de explicar la espectrsocopia de un gas atómico donde algunos de sus componentes son átomos de Rydberg. Amaldi y Segrè [25] estudiaban átomos de Rydberg de sodio en un gas de helio y observaron un cambio en la ubicación de las líneas espectrales así como un ensanchamiento de las mismas. Los resultados eran dependientes de la densidad del gas y al realizar experimentos similares con otros tipos de gases se encontró un corrimiento espectral al azul o al rojo dependiendo de la naturaleza del gas de fondo. El corrimiento al rojo podía entenderse al considerar el cambio en energía causado por la presencia de nubes electrónicas polarizables en los átomos neutros. Al incluir el potencial de polarización para todos los átomos neutros del gas se obtiene, en la aproximación de campo medio, que la energía de excitación del sistema disminuye, lo que es consistente con un corrimiento al rojo. Sin embargo, no se tiene en este esquema una explicación para

el corrimiento al azul. Fermi se dio cuenta de la importancia del proceso de dispersión y explicó el corrimiento al azul considerando las colisiones de baja energía entre el electrón de Rydberg y los átomos neutros. En las condiciones presentadas por los experimentos de Amaldi y Segrè, la mayor parte de la energía del electrón de Rydberg es potencial y la poca energía cinética tiene asociada un momento lineal pequeño. En esta situación de baja energía, la función de onda del electrón variará lentamente excepto cerca de los átomos en su estado base. Basado en esta idea, Fermi introdujo una segunda función de onda  $\tilde{\psi}$  definida como el valor medio de la original,  $\psi$ , alrededor de los perturbadores, cuya extensión espacial se supuso mucho menor a la longitud de de Broglie del electrón de Rydberg, pero lo suficientemente grande como para tener una probabilidad significativa de la presencia de átomos en su estado base. La propuesta específica fue

$$\psi = \frac{r - a_s}{r} \tilde{\psi}$$

donde al parametro  $a_s$  se le conoce como longitud de dispersión de onda s. En el límite de longitud de de Broglie grande, el cambio en la energía es proporcional a la densidad en la posición del átomo perturbador  $2\pi\hbar^2/m_e a_s \Psi(\vec{R})^* \Psi(\vec{R})$ .

Adicionalmente Fermi introduce el concepto de pseudopotencial, es decir, un potencial efectivo cuya presencia conllevaría a un corrimiento energético equivalente. En este caso el pseudopotencial de Fermi, también conocido como potencial de contacto de Fermi es

$$V(\vec{r}, \vec{R}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m_e} a_s \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{R})$$
(5)

Notese que si  $a_s > 0$  hay un corrimiento al azul y si  $a_s < 0$  el corrimiento es al rojo.

La descripción contemporánea de esta clase de procesos se realiza utilizando teoría cuántica de dispersión [26]. Para potenciales de interacción de corto alcance, se considera el límite de bajas energías y se realiza un desarrollo multipolar. Dado un corrimiento de fase de onda s,  $\delta_s(k)$ , la longitud de dispersión a se define como

$$\lim_{k \to 0} \frac{\tan \delta_s(k)}{k} = a_s.$$
(6)

mientras que para la onda p, el volumen de dispersión  $a_p^3$  es

$$\lim_{k \to 0} \frac{\tan \delta_s(k)}{k^3} = a_p^3.$$
 (7)

el pseudopotencial correspondiente a la onda p involucra gradientes de la función de onda a la que se le aplica. El número de onda k semiclasicámente se puede estimar como

$$k(R) = \sqrt{\frac{2}{R} - \frac{1}{\nu^2}}.$$
(8)

### 5 Moléculas exóticas de Rydberg

Aunque el pseudopotencial de Fermi había sido utilizado para explicar ensanchamientos de líneas de Rydberg y corrimientos de energía desde 1934, fue hasta el año 2000 cuando Chris Green y sus colaboradores [2] propusieron la idea de tratar este pseudopotencial como la base para un mecanismo de ligado molecular novedoso. Esto acontecío después de
los avances experimentales en la física a bajas temperaturas, particularmente la creación de condensados de Bose-Einstein. Las condiciones en un gas atómico degenerado son favorables para la formación de LRRM y su estabilidad pues las bajas temperaturas permiten que la pequeñez de la energía de ligadura de las moléculas no sea un impedimento para su observación. Otro aspecto importante es que en el condensado se tiene una densidad suficientemente alta para tener un número significativo de átomos separados a la distancia adecuada para lograr la formación de las moléculas.

La descripción de sistemas moleculares exóticos de Rydberg se basa en la aproximación de Born-Oppenheimer. En el caso diatómico el sistema está formado por el átomo de Rydberg (carozo y electrón) junto con el átomo perturbador. Al considerar que el movimiento del carozo de Rydberg y el perturbador es lento comparado con el del electrón –aunque este sea de Rydberg– se les trata como si estuviesen fijos y se resuelve la ecuación estacionaria de Schrödinger de forma ya sea variacional o perturbativa [27]. La figura 1 ilustra el sistema de coordenadas que se usa para realizar el estudio de la molécula. Si el origen de coordenadas se toma en el núcleo del átomo de Rydberg,  $\vec{r}$  describe la posición del electrón de Rydberg y  $\vec{R}$  la del átomo perturbador. Adicionalmente, el eje z se elige de manera que este coincida con el eje internuclear por lo que la dependencia vectorial en  $\vec{R}$  puede ser remplazada por una dependencia únicamente en la separación internuclear R.

El comportamiento de las curvas de energía electrónica (PEC's) está determinado por dos factores. Primero la longitud/volumen de dispersión que controlan la intensidad de la interacción y su comportamiento repulsivo o atractivo dependiendo de si la longitud de dispersión es positiva o negativa respectivamente. El segundo factor es la función de onda radial (onda s) o su gradiente (onda p). Las oscilaciones en las PECs son un reflejo directo de las oscilaciones en la función de onda del electrón. Las PECs tendrán pozos localizados donde la densidad de probabilidad sea máxima. Esta es una de las características que marca un contraste entre el mecanismo de ligado del pseudpotencial de Fermi y, por ejemplo, enlaces iónicos o covalentes.

Existen dos clases distintas de moléculas diatómicas exóticas. Aquellas que surgen de los estados con defecto cuántico no nulo y bajo momento angular  $\ell < \ell_{min}$  y las que provienen de los estados hidrogenoides degenerados  $\ell \ge \ell_{min}$ , donde  $\ell_{min}$  es el mínimo valor del número cuántico del momento angular orbital para el cual el defecto cuántico es despreciable  $\mu_{\ell \ge \ell_{min}} \sim 0$ . Tanto para las LRRM con  $\ell$  baja o alta, al considerar  $R \to \infty$ , las curvas de energía pueden ser etiquetadas con los correspondientes valores energéticos asintóticos del átomo de Rydberg aislado.

En el trabajo seminal Ref. [2] se predijo que las moléculas de Rydberg se formarían con separación internuclear semejante al tamaño del orbital Rydberg y que tendrían propiedades no triviales. Así, por una parte, las moléculas con orbitales que involucran momento angular orbital bajo ( $\ell < \ell_{min}$ ) acogen al átomo base sin ser deformadas significativamente (ver Figura 2). Mientras que en el caso de las llamadas moléculas trilobite y mariposa (ver Figura 3), el orbital molécular del electrón de Rydberg experimenta un cambio dramático respecto al del electrón de Rydberg aislado. Estas moléculas, como resultado del pseudpotencial de contacto, presentan una mezcla de estados de Rydberg degenerados de alto momento angular ( $\ell > \ell_{min}$ ). La función de onda resultante maximiza la densidad de probabilidad del electrón (dispersión de onda s) o su gradiente (dispersión de onda p) alrededor del perturbador. Para ellas el mecanismo de ligado resulta de la presencia cercana del electrón de Rydberg cerca del perturbador. Esta localización a su



Figure 1: Sistema de coordenadas usadas en el texto.

vez crea una separación de carga que produce un momento dipolar eléctrico permanente muy grande incluso en moléculas diatómicas homonucleares.

Las moléculas de Rydberg de rago ultra-largo de bajo momento angular l han sido producidas y estudiadas experimentalmente para Rb [28, 29], K [30] y Sr [31, 32]. Mientras que las LRRM de alto momento angular se observaron por primera vez en átomos de Cs [10, 11].



Figure 2: Densidad de probabilidad electrónica en el plano xz para una molécula Rb con n = 33 y  $\ell = 2$ .

# 6 Propiedades electrostáticas de una molécula exótica de Rydberg

El potencial electrostático  $\phi_{LRRM}(\vec{r})$  generado por un LRRM surge de la distribución de carga asociada a un orbital molecular dado y al núcleo de Rydberg, que se modela como una carga puntual unitaria positiva ubicada en el origen,

$$\phi_{LRRM}(\vec{r}) = \frac{1}{r} - \int \frac{\rho_{\beta}^{(n)}(\vec{r_s};\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r_s}|} d^3 r_s.$$
(9)

Este potencial podría aproximarse por un desarrollo multipolar. La relevancia de estos desarrollos radica en la posibilidad de truncar la serie a un orden finito que garantice una evaluación del potencial confiable con una precisión dada en una región espacial previamente elegida. En la práctica este desarrollo suele realizarse utilizando coordenadas esféricas centradas en el núcleo del átomo de Rydberg. Sin embargo, con tan sólo observar la Figura 3 parece evidente la conveniencia de utilizar un desarrollo multipolar que aproveche las simetrías del sistema [33].



Figure 3: Densidad de probabilidad electrónica en el plano xz para moléculas Rb con n = 33 y  $\ell$  alta. El núcleo de Rydberg está representado por el punto rojo y el átomo neutro por el negro. (a) Un trilobite con  $\mathbf{r}_t = 1500 a_0$ , (b) una mariposa radial con  $\mathbf{r}_{rb} = 540 a_0$  y (c) una mariposa angular con  $\mathbf{r}_{rb} = 520 a_0$ . La longitud se mide en unidades del radio de Bohr  $a_0$ .

Dado que el electrón de valencia de Rydberg tiene tanto la posición del núcleo iónico como la posición del átomo neutro como sus dos centros naturales de movimiento, las coordenadas esferoidales resultan ser las coordenadas naturales para la descripción de los orbitales electrónicos. Sea P un punto en el espacio, si P está a las distancias  $r_{PC}$  y  $r_{PN}$ de los dos centros C y N respectivamente, las coordenadas esferoidales ( $\xi, \eta, \varphi$ ) se definen como

$$\xi = \frac{r_{PC} + r_{PN}}{\mathsf{r}}, \quad \eta = \frac{r_{PC} - r_{PN}}{\mathsf{r}} \tag{10}$$

donde r es la separación entre los dos centros; la coordenada angular  $\varphi$  describe rotaciones alrededor del eje dado por el vector  $\vec{r}$  que une los dos centros.  $\vec{r}$  establece una escala de longitud natural  $\mathbf{r} = |\vec{r}|$ , de modo que las variables  $\xi$  y  $\eta$  son adimensionales.

Estas coordenadas admiten un desarrollo multipolar en términos de los armónicos esferoidales prolatos internos  $V_{\ell m}^i(\vec{r};\vec{r})$  y externos  $V_{\ell m}^e(\vec{r};\vec{r})$ [34],

$$\phi(\vec{r}) =$$

$$\frac{2}{\mathsf{r}} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \int \rho(\vec{r_s}) (2\ell+1) (-1)^m \left[ \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} \right]^2 V_{\ell m}^{i*}(\xi_{<},\eta_s,\varphi_s;\vec{\mathsf{r}}) V_{\ell m}^e(\xi_{>},\eta,\varphi;\vec{\mathsf{r}}) d^3r_s, \\
V_{\ell m}^i(\xi,\eta,\varphi;\vec{\mathsf{r}}) = \mathcal{P}_{\ell}^m(\xi) P_{\ell}^m(\eta) e^{im\varphi}; \qquad V_{\ell m}^e(\xi,\eta,\varphi;\vec{\mathsf{r}}) = Q_{\ell}^m(\xi) P_{\ell}^m(\eta) e^{im\varphi}, \tag{11}$$

que involucran a los polinomios asociados de Legendre de primera clase  $P_{\ell}^{m}(x)$   $(|x| \leq 1)$  y  $\mathcal{P}_{\ell}^{m}(x)$   $(|x| \geq 1)$ , y de segunda clase  $Q_{\ell}^{m}$ . Estas funciones son reales y están definas por



Figure 4: Potencial electrostático  $\phi_{LRRM}$  en unidades atómicas para una molécula de trilobite n = 33 (primera fila), una molécula de mariposa radial (segunda fila) y una molécula de mariposa coseno (tercera fila) en la región cercana. En (a), (e) e (i) se usa la expresión exacta; en (b), (f) y (j) se utiliza el término monopolar en coordenadas esferoidales. El error relativo en escala logarítmica se ilustra en (c), (g) y (k) tomando hasta el término dipolo esferoidal y en (d), (h) y (l) tomando hasta el término dipolo esferoidal y en (d), (h) y (l) tomando hasta el término dipolo esferoidal y en r<sub>t</sub> = 1500 a<sub>0</sub> para el trilobite,  $r_{rb} = 540$  a<sub>0</sub> para la mariposa radial y  $r_{cb} = 520$  a<sub>0</sub> para la molécula coseno mariposa.

la fórmula de Ferrer

$$P_{\ell}^{m}(x) = (1 - x^{2})^{m/2} \frac{d^{m}}{dx^{m}} P_{\ell}(x) \quad , \quad |x| \le 1, 0 \le m \le \ell,$$
(12)

$$P_{\ell}(x) = \frac{1}{2^{\ell}\ell!} \frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}} (x^2 - 1)^{\ell} \quad , \tag{13}$$

$$Q_{\ell}^{m}(x) = (-1)^{m} (x^{2} - 1)^{|m|/2} \frac{d^{m}}{dx^{m}} Q_{\ell}(x) \quad , \quad x > 1, |m| \le \ell,$$
(14)

$$Q_{\ell}(x) = \frac{1}{2^{\ell}\ell!} \frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}} \left[ (x^2 - 1)^{\ell} \ln\left(\frac{x+1}{x-1}\right) \right] - \frac{1}{2} P_{\ell}(x) \ln\left(\frac{x+1}{x-1}\right),$$
(15)

para $m \geq 0$ y

$$P_{\ell}^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_{\ell}^m(x)$$
(16)

si esto no se cumple.

En los siguientes párrafos, comparamos  $\phi(\vec{r})$  evaluado usando la expresión exacta Eq. (9) con el resultado de las expansiones esferoidal y esférica multipolar hasta términos dipolares [33]. Notése que aunque los momentos monopolares y dipolares internos para coordenadas esféricas esferoidales prolatas pudieran ser semejantes en su valor numérico, sus potenciales electrostáticos difieren, ya que

$$V_{00}^{e}(\vec{r};\vec{r}) = \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\xi+1}{\xi-1}\right) \quad , \quad V_{10}^{e}(\vec{r};\vec{r}) = \eta\left(-1 + \frac{\xi}{2} \ln\left(\frac{\xi+1}{\xi-1}\right)\right), \tag{17}$$

$$U_{00}^{e}(\vec{r}) = \frac{1}{r} , \quad U_{10}^{e}(\vec{r}) = \frac{\cos\theta}{r^{2}}.$$
 (18)

La simetría bajo rotaciones alrededor del eje internuclear de trilobites, orbitales electrónicos  $m = \pm 1$  mariposa angulares y radiales, permite visualizar el comportamiento general del potencial calculándolo en cualquier plano que contenga el eje z. El error relativo dado por

$$\left|\frac{\phi_{LRRM}(\vec{r}) - \phi^{(\ell)}(\vec{r})}{\phi_{LRRM}(\vec{r})}\right|,\tag{19}$$

para expansiones que consideran hasta un término  $\ell$ , puede tomarse como figura de mérito.

Teniendo en cuenta la estructura de las expansiones multipolares, se consideran tres regiones espaciales diferentes. La región cercana que aquí se toma como la que se extiende desde el núcleo del átomo de Rydberg hasta un par de veces la separación internuclear (~  $3000 a_0$  para moléculas de trilobite Rb con n = 33). Allí, los detalles de la estructura del orbital electrónico son más evidentes. La segunda región es la región lejana, aquí tomada en aproximadamente  $12 \cdot r$  (~  $18000 a_0$ ). Esta región es particularmente importante para la descripción de interacciones electrostáticas en gases diluidos. Finalmente estudiamos una región intermedia (~  $7000 a_0$  del núcleo de Rydberg).

Los cálculos muestran, como se ilustra en la Figura 4, que con sólo el término monopolar esferoidal se tiene información básica del potencial electrostático. Mientras que la expansión en coordenadas esféricas requiere del momento dipolar y cuadrupolar. Adicionalmente al calcular la dispersión del momento dipolar esférico resulta que esta es comparable en magnitud al valor medio. Es decir, las moléculas exóticas de  $\ell$  alto poseen momentos dipolares esféricos enormes, sin embargo su potencial es descrito en forma más compacta (sobre todo en la región cercana) utilizando un desarrollo en las coordenadas esferoidales prolatas.

## 7 Perspectivas

Durante el último par de décadas, se han creado en laboratorio tipos no antes conocidos de materia, como las moléculas de Rydberg, y la materia colectiva de Rydberg, El punto de partida es por lo general un gas atómico frío en el que se induce la formación de átomos de Rydberg; estos interactuarán ya sea con otros átomos de Rydberg o con átomos en su estado fundamental.

Las moléculas de Rydberg son una plataforma para estudiar la dispersión cuántica de baja energía y la espectroscopia de los gases cuánticos correspondientes. Las interacciones átomo de Rydberg-átomo de Rydberg reciben una mayor atención pues permiten diseñar estados colectivos potencialmente útiles para ingeniería cuántica.

Las LRRM poseen propiedades exageradas. Los macrodímeros de Rydberg tienen potenciales de interacción que podrían ser controlados con relativa facilidad. Otro tipo

de moléculas de Rydberg no descritas en esta breve reseña son las moléculas macropoliatómicas ya sean homo o heteronucleares [35, 36].

Recientemente se crearon LRRM heteronucleares, además de LRRM constituidas por un ion y un átomo de Rydberg [37]. Los experimentos también proporcionan importantes avances en la ingeniería de la química cuántica de LRRM mediante el control de la longitud de enlace, el estado vibratorio, el momento angular y la orientación en un campo eléctrico externo débil [9].

# References

- E. Fermi, Sopra lo spostamento per pressione delle righe elevate delle serie spettrali, Nuovo Cimento 11, 157 (1934)
- [2] C. H. Greene, A. S. Dickinson, and H. R. Sadeghpour, Creation of Polar and Nonpolar Ultra-Long-Range Rydberg Molecules, Phys. Rev. Lett. 85, 2458 (2000).
- [3] A. A. Khuskivadze, M. I. Chibisov, and I. I. Fabrikant, Adiabatic energy levels and electric dipole moments of Rydberg states of Rb<sub>2</sub> and Cs<sub>2</sub> dimers, Phys. Rev. A 66, 042709 (2002).
- [4] E. L. Hamilton, C. H. Greene, and H. R. Sadeghpour, *Shape-resonance-induced long-range molecular Rydberg states*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 35, L199 (2002).
- [5] W. Li, T. Pohl, J. M. Rost, S. T. Rittenhouse, H. R. Sadeghpour, J. Nipper, B. Butscher, J. B. Balewski, V. Bendkowsky, R. Löw, and T. Pfau, A homonuclear molecule with a permanent electric dipole moment, Science 334, 1110 (2011).
- [6] M. A. Bellos, R. Carollo, J. Banerjee, E. E. Eyler, P. L. Gould, and W. C. Stwalley, *Excitation of weakly bound molecules to trilobite like Rydberg states*, Phys. Rev. Lett. 111, 053001 (2013).
- [7] A. T. Krupp, A. Gaj, J. B. Balewski, P. Ilzhöfer, S. Hofferberth, R. Löw, T. Pfau, M. Kurz, and P. Schmelcher, *Alignment of d-state Rydberg molecules*, Phys. Rev. Lett. 112, 143008 (2014).
- [8] D. A. Anderson, S. A. Miller, and G. Raithel, *Photoassociation of long-range nd Rydberg molecules*, Phys. Rev. Lett. 112, 163201 (2014).
- [9] T. Niederprüm, O. Thomas, T. Eichert, C. Lippe, J. Pérez-Ríos, C. H. Greene and H. Ott, Observation of pendular butterfly Rydberg molecules, Nature Comm. 7, 12820 (2016)
- [10] J.Tallant, S. T. Rittenhouse, D Booth, H R Sadeghpour, J P Shaffer, Observation of blueshifted ultralong-range Cs2 Rydberg molecules, Phys. Rev. Lett. 109, 173202 (2012).
- [11] D. Booth, S. T. Rittenhouse, J. Yang, H. R. Sadeghpour, and J. P. Shaffer. Production of trilobite Rydberg molecule dimers with kilo-debye permanent electric dipole moments, Science, 348, 99 (2015).
- [12] B. J. DeSalvo, J. A. Aman, F. B. Dunning, T. C. Killian, H. R. Sadeghpour, S. Yoshida, and J. Burgdörfer, *Ultra-long-range Rydberg molecules in a divalent atomic system*, Phys. Rev. A **92**, 031403(R) (2015).
- [13] M. J. Seaton, Quantum defect theory, Reports on Progress in Physics, 46,167(1983).
- [14] M. Marinescu, H. R. Sadeghpour, and A. Dalgarno, Dispersion coefficients for alkalimetal dimers, Phys. Rev. A 49, 982 (1994).
- [15] T. Gallagher, *Rydberg Atoms*, Cambridge University Press, 1994.

- [16] R.Löw, H. Weimer, J. Nipper, J. B.Balewski, B. Butscher, H.P. B., and T. Pfau, An experimental and theoretical guide to strongly interacting Rydberg gases, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 45, (2012).
- [17] T. Walker and M. Saffman, Zeros of Rydberg-Rydberg Föster Interactions, J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 38, (2005)
- [18] J. Raimond,G. Vitrant and S. Haroche, Spectral line broadening due to the interaction between very excited atoms: 'the dense Rydberg gas', J. Phys. B: At. Mol. Phys. 14, L655 (1981).
- [19] R. Heidemann, U. Raitzsch, V. Bendkowsky, B. Butscher, R. Löw, L. Santos, and T. Pfau, Evidence for coherent collective Rydberg excitation in the strong blockade regime, Phys. Rev. Lett. 99, 163601 (2007).
- [20] E. Urban, T. Johnson, T. Henage, L. Isenhower, D. Yavuz, T. Walker and M. Saffman, Observation of Rydberg blockade between two atoms, Nature Physics 5, 110114 (2009).
- [21] Silvia Cárdenas López, Tesis de maestría: Atomos de Rydberg y efectos colectivos, Posgrado en Ciencias Físicas U.N.A.M (2020).
- [22] M. Saffman, Quantum computing with atomic qubits and Rydberg interactions: Progress and challenges, J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys. 49, 202001 (2016).
- [23] A. Browaeys and T. Lahaye, Many-body physics with individually controlled Rydberg atoms, Nature Physics 16, 132 (2020).
- [24] M. Morgado and S. Whitlock, Quantum simulation and computing with Rydberginteracting qubits, AVS Quantum Sci. 3, 023501 (2021).
- [25] E. Amaldi and E. Segrè, Effect of pressure on high terms of alkaline spectra, Nature 133, 141 (1934).
- [26] C. J. Joachain, *Quantum Collision Theory*, North Holland, Amsterdam (1979).
- [27] Homar Riverra Rodríguez, *Tesis doctoral Correlacionescuánticas en moléculas exóticas de Rydberg*, Posgrado en Ciencias Físicas U.N.A.M (2023).
- [28] D. A. Anderson, S. A. Miller, and G. Raithel, Photoassociation of long-range nd Rydberg molecules, Phys. Rev. Lett. 112, 163201 (2014).
- [29] T. Eichert, T. Niederprum, O. Thomas and H.Ott, Rydberg molecule- induced remote spin flips., Phys. Rev. Lett. 117,123002 (2016).
- [30] M. Peper and J. Deiglmayr, *Photodissociation of long-range Rydberg molecules*, Phys. Rev. A 102, 062819 (2020).
- [31] C. Fey, M. Kurz, P. Schmelcher, S. Rittenhouse, and H. Sadeghpour. A comparative analysis of binding in ultralong-range Rydberg molecules. New Journal of Physics, 17, 01 2015.

- [32] S. K. Kanungo T. C. Killian F. B. Dunning S. Yoshida Y. Lu, J. D. Whalen and J. Burgdorfer, *Resolving rotationally excited states of ultralong-range Rydberg* molecules, Phys. Rev. A **106**, 022809 (2022).
- [33] H Rivera-Rodríguez and R Jáuregui, On the electrostatic interactions involving longrange Rydberg molecules, J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 54, 175101 (2021).
- [34] G. Jansen, Transformation properties of spheroidal multipole moments and potentials, J. Phys. A: Math. Gen. 33, 1375 (2000).
- [35] S. T. Rittenhouse y H. R. Sadeghpour, Phys. Rev. Lett. 104, 243002 (2010).
- [36] M. T. Eiles, Trilobites, butterflies, and other exotic specimens of long-range Rydberg molecules, J. of Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 52, 113001 (2019).
- [37] A. Duspayev, X. Han, M. A. Viray, L. Ma, J. Zhao, and G. Raithel Long-range Rydberg-atom-ion molecules of Rb and Cs, Phys. Rev. Research 3, 023114 (2021).





# Láseres de Cascadeo Cuántico (QCL) y Cavidades Ópticas tipo Herriott: Definiciones, configuraciones y aplicaciones.

Dr. Antonio Marcelo Juárez Reyes Instituto de Ciencias Físicas <u>amjuarez@icf.unam.mx</u>

En este trabajo se hace una descripción breve del funcionamiento y las características principales de dos sistemas ópticos usados en el análisis hecho por espectrometría de absorción en el rango de infrarrojo medio (de 3 a 8 micrómetros): Los láseres de cascadeo cuántico (QCL) y las cavidades ópticas tipo Herriott. Se describen los principios fundamentales de su funcionamiento, las distintas configuraciones usadas actualmente y las aplicaciones directas que tienen en distintos campos de investigación como lo son estudios ambientales, monitoreo de la calidad del aire, diagnóstico médico y excitación selectiva de especies moleculares.

In this work we make a brief description of the working mechanisms and the main characteristics of two optical systems widely used in analysis by mid-infrared absorption spectroscopy (ranging from 3 to 8  $\mu$ m): Quantum cascade lasers (QCL) and Herriott-type multipass absorption cells. We describe the fundamental principles of each one as well as the different configurations used and their main applications in multiple research fields such as ambient studies, air quality monitoring, medical diagnosis and selective excitation of molecular species.

### I. LÁSER DE CASCADEO CUÁNTICO (QCL)

El láser de cascadeo cuántico (abreviado como QCL, del inglés Quantum Cascade Laser) es un tipo especial de láser semiconductor demostrado experimentalmente, por primera vez, en 1994 por Jerome Faist et al[1]. Se caracteriza porque su emisión se logra a través de transiciones entre sub-bandas de una estructura compuesta por una pila de pozos de potencial cuánticos (figura 1). En contraste con los láseres típicos (semiconductores o de estado sólido) que emiten a través de la recombinación de pares electrón-hueco, el QCL tiene la ventaja de que un solo electrón puede generar múltiples fotones al pasar de un pozo a otro gracias al efecto túnel (de ahí su nombre). Los sistemas QCL emiten, típicamente, en la región del infrarrojo medio.



Fig. 1. Esquema del funcionamiento de un sistema de cascadeo cuántico. El electrón sufre una transición entre subbandas (líneas punteadas) impulsado por un campo eléctrico externo (línea roja sólida) y, en el proceso, emite un fotón (ñω). Después, pasa al siguiente pozo de potencial por efectos de tunelaje cuántico y el proceso se repite.

#### 1. Fundamentos físicos de los QCL

Los QCL están compuestos de múltiples capas alternantes de material semiconductor crecido epitaxialmente, formando pozos de potencial cuántico que confinan los electrones a niveles de energía particulares. Conforme cada electrón atraviesa el medio de ganancia va pasando de un pozo de potencial al siguiente (mediante efectos de tunelaje cuántico) impulsado por el voltaje aplicado en el sistema.

En posiciones determinadas con precisión, llamadas "regiones activas", el electrón pasa de un estado de energía en una banda de valencia a un nivel más bajo y en el proceso emite un fotón. El electrón continúa viajando y cuando llega a la siguiente región activa hace otra transición y emite otro fotón. Un QCL típico puede tener docenas de regiones activas, y cada electrón individual que las atraviese puede generar ese mismo número de fotones. De este modo se genera una "cascada" de fotones a partir de un solo electrón inyectado en el sistema, lo que tiene como consecuencia que los sistemas QCL exhiben una ganancia decenas de veces superior a la de los láseres convencionales.

En los QCL la inversión de población se logra aprovechando los estados electrónicos discretos que surgen del confina- miento cuántico que ocurre en la dirección normal a las capas. Paralelamente a estas capas, los estados electrónicos presen- tan dispersión de onda plana y las sub-bandas correspondientes son paralelas también, de modo que todos los electrones que hagan una transición entre sub-bandas (por ejemplo, del nivel n = 3 a n = 2 como se ilustra en la figura 2) emitirán fotones de la misma frecuencia v, de modo que la emisión es coherente. Posteriormente, cada electrón decae a un nivel más bajo (n = 1) principalmente mediante un proceso de relajación por fonones ópticos altamente eficiente, ya que la transferencia de momento durante el mismo es casi cero [1].

Posteriormente cada electrón pasa a la siguiente región activa por efecto túnel, de modo que nuevamente entra al nivel n = 3 de la siguiente estructura y puede repetir el proceso.

La longitud de onda de los QCL depende del espesor y la estructura de las capas que constituyen la "escalera" de pozos de potencial. Esto significa que cada QCL puede diseñarse con una longitud de onda específica en mente y puede ajustarse de una manera que no se consigue con otros tipos de laser. Además, esto permite su diseño para aplicaciones de espectroscopía de absorción en el infrarrojo medio, donde otros tipos de láser son escasos o inexistentes [2].

#### 2. Tipos de QCL

A pesar de ser una tecnología relativamente nueva, el desarrollo de los QCL ha crecido a grandes pasos a partir de su primera aparición en 1994 y ahora encuentra aplicaciones en diversas áreas de investigación científica. Aun así, el mecanismo fundamental explicado en la sección anterior es universal a todo láser QCL pero, dependiendo del uso que se le vaya a dar, es posible modificar algunos parámetros de su construcción para optimizar los resultados buscados.

El mecanismo de transiciones entre sub-bandas requiere de una guía de onda donde se confine el medio de ganancia para poder dirigir la luz emitida en un haz colimado. Para ello, se puede construir un resonador óptico con el fin de volver a introducir los fotones en el medio de ganancia y amplificar la emisión estimulada. Existen diferentes tipos de QCL dependiendo del tipo de guía de onda que utilizan, siendo los dos más comunes:

**1. Guía de onda tipo cresta:** Este tipo de guía de onda se crea grabando trincheras paralelas en el material de ganancia de cascadeo cuántico, lo que genera zonas aisladas de aproximadamente  $10 \,\mu$ m de espesor y algunos milímetros de largo. Un material dieléctrico se deposita en las trincheras para guiar la corriente a lo largo del grabado y posteriormente toda la cresta se recubre con oro para proporcionar conexión eléctrica y remover calor de la cresta cuando está produciendo luz. La luz es emitida desde los extremos de la guía de onda, y las regiones activas son típicamente de unos pocos micrómetros de espesor (figura 3).

#### Escuela de Verano 2022 Instituto de Ciencias Físicas



Fig. 3. Fotografía de la faceta de una guía de onda tipo cresta. Zona de color gris oscuro: InP, gris claro: capas de material de ganancia, negro: dieléctrico, dorado: capa de Au. La fotografía representa la sección transversal de la guía de onda, de modo que la luz se guía en la dirección normal a la imagen.

**2. Heteroestructura enterrada:** En este tipo de guía de onda también se hace un grabado en el material de ganancia pero, a diferencia de las guías tipo cresta, en las heteroestructuras se deposita un nuevo material semi- conductor sobre la trinchera. El cambio en índice de refracción entre el material de ganancia de cascadeo cuán- tico y el material adicional es suficiente para crear una guía de onda. Un material dieléctrico se deposita sobre la estructura resultante de modo que se guía la corriente eléctrica hacia el material de ganancia. La guía de onda tipo heteroestructura enterrada es eficiente para remover calor de la región activa durante el proceso de emisión de luz (figura 4).



Fig. 4. Fotografía de la faceta de una guía de onda tipo heteroestructura enterrada. Gris oscuro: InP, gris claro: capas QC, negro: dieléctrico.

También existen diferentes tipos de resonador óptico, siendo los más notables:

- Láser tipo Fabry-Pérot: La versión más sencilla de QCL. En la guía de onda del material de cascadeo cuán- tico, se cortan los extremos de modo que la estructura cristalina del semiconductor forme dos espejos parale- los en los extremos de la guía de onda, creando así un resonador de Fabry-Pérot. Este tipo de láseres pueden producir potencias altas, pero se vuelven multimodales a corrientes de operación grandes.
- 2. Láser de retroalimentación distribuida: Un QCL de retroalimentación distribuida (DFB, del inglés *Distributed Feedback*) es similar a un láser Fabry-Pérot pero tiene la ventaja de incluir un reflector de Bragg distribuido (DBR, del inglés *Distributed Bragg Reflector*) sobre la guía de onda para emitir únicamente en la longitud de onda deseada. De este modo, el QCL tipo DFB con DBR sigue siendo unimodal incluso a corrientes altas, y tiene la posibilidad de usarse con técnicas de amplificación de pulso gorjeado (*chirping pulse amplification*) a través de pulsos rápidos y *mode-locking*.
- 3. Láser de cavidad extrema: Un láser de cavidad externa (EC del inglés External Cavity) tiene una capa de material antirreflejante en una o ambas de las facetas de la guía de onda, de modo que no se puede usar el mismo medio de ganancia como resonador. Entonces se agrega un arreglo de espejos y lentes alrededor de la guía de onda para crear la cavidad óptica. De este modo, si se agrega un elemento selector de longitud de onda (como lo puede ser una rejilla de difracción) se puede crear un QCL sintonizable (figura 5). Cabe mencionar que Day- light Solutions, Inc [3], la empresa líder en el mercado de QCLs, utiliza este tipo de cavidad óptica en sus pro- ductos debido al alto grado de sintonización que pueden tener, preservando anchos de banda finos (figura 6).



Fig. 5. Esquema de un QCL tipo EC. El medio de ganancia es cubierto con una capa antirreflejante de modo que la guía de onda deja de actuar como resonador. Dependiendo de la configuración externa de espejos y lentes, el láser puede ser sintonizable.



Fig. 6. Diagrama del sistema QCL tipo EC utilizado por Daylight Solutions, Inc. El chip de ganancia se coloca entre dos lentes colimadores para la recolección de la emisión altamente divergente del medio QC. La rejilla de difracción contiene un sistema de movimiento para poder seleccionar las frecuencias de radiación deseadas, lo que provoca una emisión láser con un ancho de banda muy fino. Con ajustes adicionales en el tamaño de la cavidad para que coincida con la longitud de onda deseada, se puede obtener sintonización de fase continua. Imagen de [3].

#### 3. Aplicaciones de QCL

El QCL tiene un amplio rango de aplicaciones, desde el sensado de precisión, espectroscopía, análisis médico e incluso aplicaciones militares. El amplio rango de sintonización posible y el rápido tiempo de respuesta, además de su tamaño compacto, permite su integración en dispositivos más pequeños y precisos que los láseres semiconductores típicos. Algunas de las aplicaciones más relevantes de QCL en la actualidad son:

- Detección de trazas moleculares en gases: La mayo- ría de los elementos químicos de interés en monitoreo ambiental (gases fósiles) y diagnóstico médico (aliento humano) presentan un espectro de absorción fuerte en el rango de infrarrojo medio como resultado de sus transiciones vibracionales. De este modo, los QCL pueden ser usados eficientemente en espectroscopía de absorción en estas especies químicas, y combinado con otras técnicas (como lo puede ser el uso de cavidades ópticas tipo Herriott, que se discutirán en la siguiente sección) pueden usarse para la detección y monitoreo de especies moleculares de muy baja concentración (partes por billón) o para identificar líneas espectrales débiles.
- 2. Aplicaciones de detección directa: Usando un QCL se pueden crear dispositivos de detección de drogas mediante su huella espectral hasta en cantidades del orden de nanogramos. En el área de seguridad y vigilancia esto presenta una gran ventaja, ya que se pueden usar apa- ratos pequeños y muy sensibles para el rastreo de drogas ilícitas. También se pueden usar los QCL para la detección de huellas de materiales explosivos a una distancia segura, en el rango de Tera Hertz. Esta tecnología puede usarse tanto en tierra como en el aire, para aumentar la seguridad de naves aéreas contra misiles rastreadores de calor. Daylight Solutions, Inc, ya tiene a la venta modelos basados en los

QCL diseñados para este tipo de aplicaciones de grado militar [3].

**Tecnología aeroespacial:** Los QCL tienen la gran ven- taja de que pueden usarse sin ningún problema a temperatura ambiente. Esto los hace ideales para el monitoreo atmosférico de los gases de invernadero, pero también ofrece la posibilidad de desarrollo de dispositivos QCL pensados en el estudio de atmósferas extraterrestres. Es posible diseñar equipos de análisis atmosférico incorporados en *rovers* y sondas debido a su tamaño reducido; en particular el rango espectral entre 3 y 12  $\mu$ m (en el que ya existen modelos de QCL comerciales) es ideal para el estudio de las atmósferas de Marte, Titán, Venus y Europa. Finalmente, la misma tecnología puede ocuparse para examinar los componentes del motor de las aeronaves de forma no-invasiva y así aumentar la probabilidad de éxito de misiones espaciales futuras hacia los cuerpos celestes mencionados, lo cual es un tema de gran interés científico y popular actualmente [5].

#### II. CAVIDADES ÓPTICAS TIPO HERRIOTT

El análisis de moléculas mediante espectroscopia de absorción requiere, necesariamente, de la interacción de materia con radiación electromagnética. Es de particular interés maximizar el número de eventos de absorción en el análisis de componentes de baja concentración en una muestra, así como en el estudio de líneas débiles del espectro de gases. Para conseguirlo, se ocupan cavidades ópticas con espejos esféricos que permitan la reflexión de un solo haz luminoso muchas veces. De este modo se incrementa el camino óptico efectivo sin la necesidad de crear una cavidad extremadamente larga y, por lo tanto, aumenta el número de eventos de absorción. Esto tiene como consecuencia un aumento en la sensibilidad de detección de las líneas espectrales de absorción buscadas.

Este tipo de cavidades ópticas se conocen en general como "celdas de absorción de paso múltiple" (en inglés, *multipass absorption cells*) debido a que tienen la cualidad de lograr múltiples reflexiones del haz de luz a través de un volumen constante y pequeño de gas. Un tipo particular de cavidad óptica de paso múltiple es la celda tipo **Herriott**, que apareció por primera vez en 1965 en un artículo publicado por Donald

R. Herriot (de quien obtiene su nombre) y Harry J. Schulte [4] en el que describen una celda que consiste de dos espejos esféricos opuestos con un pequeño agujero en uno de ellos a modo de puerto de entrada y salida de un haz de luz que se refleja decenas de veces dentro de la cavidad (figura 7). Es también posible que el haz de luz salga por el espejo opuesto mediante otro agujero en una posición determinada o usando una fibra óptica para su extracción (figura 8); e incluso una sola celda tipo Herriott puede ocuparse para varios haces simultáneos usando múltiples agujeros de entrada y salida. La posición del agujero de entrada también puede estar en el centro del espejo o fuera del eje, dependiendo de la geometría a utilizar.

La característica principal de la cavidad Herriott es que la longitud efectiva del camino óptico depende de la separación entre los espejos. Esto tiene la desventaja de que, una vez construida, una celda Herriott tiene una longitud fija y, por lo tanto, un número de reflexiones y longitud total de camino óptico únicos. Es por esto que es muy importante definir de manera precisa los parámetros óptimos de una celda Herriott antes de su construcción, a fin de que se optimice su funcionamiento para la aplicación específica que se le quiera dar.

#### 1. Parámetros de absorción en la cavidad óptica

En general, todas las cavidades ópticas (incluyendo las cavidades tipo Herriott y las cavidades de los QCL discutidos en la sección anterior) poseen diversos parámetros que definen sus propiedades. Algunos de los más importantes son:

1. Rango espectral libre, FSR (del inglés Free Spectral Range): El rango espectral libre de una cavidad óptica representa el espaciamiento entre dos modos longitudinales (máximos) en términos de la frecuencia (figura 9). Un modo longitudinal es una condición de interferencia constructiva en la cavidad, ya que ocurre cuando la separación entre los espejos d es igual a un múltiplo entero de la mitad de la longitud de onda,  $n\lambda/2$ . Así, dos frecuencias diferentes separadas por el FSR tienen  $\Delta n = 1$ . El FSR de una cavidad de longitud L con geometría no-confocal se obtiene mediante la expresión:

$$\Delta v_{FSR} = \frac{c}{2L} \tag{1}$$

Donde c es la velocidad de la luz.

 Fineza de la cavidad: Es una medida del ancho de banda de los modos de la cavidad (figura 9). Se determina como:

$$F = \frac{\pi R}{(1-R)}$$
(2)

Donde *R* es la reflectividad de los espejos.

3. **Parámetros g:** Los parámetros-g o parámetros geométricos de una cavidad óptica de longitud *L* se definen como:

$$g_n = 1 - \frac{L}{r_n} \tag{3}$$

Donde *n* es el índice del espejo (en el caso de cavidades Herriott, n = 1, 2) y *r* su radio de curvatura. Estos parámetros sirven para definir condiciones de estabilidad, pues para una geometría no-confocal se alcanza una cavidad estable cuando se cumple:

$$0 \le g_1 g_2 \le L \tag{4}$$

De las ecuaciones (3) y (4) se observa que una cavidad con dos espejos idénticos es ópticamente estable si 0 < L < r o si r < L < 2r [6]. Otras geometrías, como la de espejos paralelos ( $r_1 = r_2 = \infty$ ) o la confocal ( $r_1 = L = r_2$ ) están en el límite de estabilidad (figura 10).

**4. Estructura modal de la cavidad:** Las frecuencias de modos resonantes para una cavidad óptica con dos espejos con parámetros-g  $g_1$  y  $g_2$  están dadas por:

$$v_{gmn} = \frac{c}{2L} q + \frac{n+m+1}{\pi} \arccos(\sqrt[4]{g_1 g_1})$$
 (5)

Donde los parámetros m,  $n \ge q$  son los índices moda- les que especifican las características longitudinales (q) y transversales  $(m \ge n)$  de los modos del campo electromagnético (recordemos que la radiación es una onda transversal tridimensional). La diferencia en frecuencia entre dos modos longitudinales resonantes con la misma  $m \ge n$  es el FSR de la cavidad (ecuación (1)). Modos con los mismos valores de  $m \ge n$  pero diferente q son llamados modos transversales.

#### 1. Espejos y patrones en la cavidad óptica

Existen diferentes tipos de espejos que se pueden utilizar en una cavidad óptica tipo Herriott. Como se puede apreciar en la figura <u>10</u>, la geometría de cada tipo de espejo determina el parámetro-g del mismo y, de ese modo, su estabilidad. La geometría de los espejos usados, así como la separación entre las celdas y la posición del agujero de entrada del haz, determinan el número de reflexiones dentro de la cavidad. En una cavidad Herriott con espejos esféricos los puntos de reflexión (en inglés, *spots*) forman un patrón elíptico (figura <u>11</u>). Una de las principales desventajas de esta configuración es que la mayor parte de la superficie reflejante es desperdiciada, pues los spots forman un patrón de elipse hecha de puntos espaciados por un ángulo  $\theta$  por cada viaje de ida y vuelta en la cavidad (figura

<u>12</u>). El ángulo  $\theta$  depende de la separación entre los espejos y sus radios de curvatura, y este ángulo determina la condición de reentrada (es decir, la condición bajo la cual el haz repite el mismo camino) en la celda Herriott como:

$$N\theta = 2M\pi \tag{6}$$

Donde *M* y *N* son números enteros. En particular, *N* es el número total de pasos que da el haz dentro de la celda, de modo que la ecuación (6) simplemente nos dice que el número total de reflexiones multiplicado por el ángulo que separa cada reflexión sucesiva debe ser un múltiplo entero de  $2\pi$  para que el haz pueda salir de la cavidad. En el caso de cavidades con el agujero en el centro de uno de los espejos,  $\theta = \pi$  y el patrón de spots que se obtiene es una línea.



Frecuencia Relativa

**Fig.** 9. En una cavidad óptica, los máximos igualmente espaciados (en cuanto a frecuencia) son los modos. En este diagrama se representa la función idealizada de transmisión para diferentes reflectividades *R* de los espejos. Al incrementar la reflectividad incrementa la fineza de la cavidad. La distancia entre modos es el FSR. Imagen de [6].



Fig. 10. Diagrama de estabilidad para distintos valores de los parámetros-g en distintas geometrías. El área sombreada de amarillo indica la zona de estabilidad. Imagen de [6].



Fig. 11. Patrón elíptico de spots sobre espejos esféricos en una cavidad óptica. Imagen de [4].

Para aumentar el número de spots en una cavidad, Herriott y Schulte (1965) propusieron el uso de espejos con astigmatismo para generar patrones de Lissajous en la superficie reflejante (figura 13). De este modo, la ligera deformación altera la trayectoria del haz luminoso y se aprovecha una mayor parte de la superficie de los espejos. La componente cilíndrica que se agrega a los espejos esféricos para lograr el astigmatismo no es muy grande, tan solo de una fracción de porcentaje [4].



Fig. 12. Diagrama del ángulo de espaciamiento entre reflexiones sucesivas, en el caso de un patrón circular. Imagen de [7].

El radio de curvatura de los espejos también tiene importancia. Si el radio está cerca del caso confocal (r = L) entonces solo habrán un poco más de dos spots por ciclo de la elipse en cada coordenada; mientras que en espejos no-confocales se pueden lograr spots muy cercanos entre sí siguiendo un patrón de Lissajous.

#### 3. Aplicaciones de cavidades ópticas tipo Herriott.

Las cavidades ópticas en general tienen muchas aplicaciones en tecnología óptica e instrumentos de medición de alta precisión gracias a la cualidad de multiplicar el camino óptico efectivo recorrido dentro de una celda pequeña decenas de veces, además de que los modos estacionarios que se forman dentro de las mismas y los fenómenos de interferencia que surgen como consecuencia son muy útiles para seleccionar frecuencias específicas para la radiación que sale de la cavidad, dentro de anchos de banda muy estrechos. Esto tiene consecuencias directas en el diseño de láseres.

Los láseres son aparatos ampliamente utilizados tanto en la industria como en la investigación. La cavidad óptica del láser es una pieza crucial de su construcción puesto que dentro de ella ocurre y se amplifica el proceso de emisión estimulada, además de que una determinación precisa de la geometría de la cavidad es fundamental para determinar la longitud de onda en la que va a emitir el láser. Existen múltiples geometrías

usadas en las cavidades ópticas para láseres (figura <u>14</u>), y el diseño de las mismas es un área muy activa y prolífera de investigación hoy en día. Las cavidades ópticas tipo Herriott ven aplicaciones interesantes en el diseño de cavidades para láser a modo de resonador, con el fin de aumentar los eventos de emisión estimulada dentro del medio láser.

Por otro lado, en el campo de la espectroscopía láser, para medir el coeficiente de absorción de la luz en un gas o algún otro efecto que resulte de la interacción del gas con la luz (como lo puede ser un cambio de fase o intensidad) se necesitan medir cambios muy pequeños en la frecuencia óptica del láser que atraviesa la muestra. Los resultados con frecuencia se presentan como espectros de absorción que sirven para identificar las especies químicas presentes en el gas y medir su concentración. Algunas aplicaciones típicas e importantes de la espectroscopía láser de absorción son:

- Estudios ambientales: En la era post-industrial, es de gran interés medir la concentración de contaminantes y gases de invernadero en la atmósfera. Algunas especies químicas de este tipo son NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, CO y CO<sub>2</sub>, de los cuales el dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>) es de particular interés en México debido a que este país no cumple con los estándares de exposición a tal reactivo recomendados por la OMS. El dióxido de nitrógeno ocasiona irritación en las vías respiratorias y daño en el tejido celular de los pulmones[6], por lo que su monitoreo es de importancia no solo ambiental, sino también de salubridad.
- Monitoreo del aire a puertas cerradas: Este es el caso de detección y monitoreo de los niveles de dióxido o monóxido de carbono, ambos gases altamente tóxicos para el ser humano, dentro de espacios cerrados donde puedan producirse, como lo son laboratorios químicos y minas. Debido a que estas sustancias no tienen olor ni color característico y a que un ser humano puede sofocarse con ellas sin siquiera darse cuenta, es importante mantener un sistema de ventilación adecuado en espacios cerrados como los ya mencionados, así como monitorear los niveles de dichos químicos presentes en el aire para asegurar el funcionamiento correcto de la ventilación utilizada.
- Análisis para diagnóstico médico: Se puede recurrir a un análisis de la composición química del aliento exhalado por un paciente bajo tratamiento para monitorear su progreso, o incluso utilizar la misma técnica para el diagnóstico médico buscando especies químicas específicas mezcladas en el aliento del paciente. En este ámbito es particularmente importante detectar elementos en muy bajas concentraciones y con líneas de absorción débil, además de hacer una caracterización bien diferenciada entre la multitud de especies gaseosas presentes en el aliento del paciente[9].
- Excitación selectiva de especies moleculares: La fuente de emisión en el infrarrojo medio por excelencia es el QCL discutido en la sección anterior. Combinado con una cavidad óptica multipaso, como la tipo Herriott, se pueden alcanzar niveles de detección altamente precisos y de este modo monitorear especies químicas presentes en muy bajas concentraciones (par- tes por billón) o con líneas de absorción débil sin problema alguno. También en este apartado es importante mencionar la *excitación selectiva de especies moleculares*, ya que la alta sintonización del QCL permite elegir la longitud de onda de emisión con un ancho de ban- da sumamente estrecho, y junto con el alto número de eventos de interacción luz-materia proporcionado por la cavidad tipo Herriott, se pueden excitar especies mole- culares específicas para el análisis de sus propiedades electrónicas, como lo son la movilidad de portadores de carga y el coeficiente de difusión del enjambre de electrones excitados.

#### GLOSARIO

**amplificación de pulso gorjeado:** La amplificación de pul- so gorjeado (abreviado CPA del inglés *Chirping Pulse Amplification*) es una técnica para amplificar un pulso de láser ultracorto hasta el nivel de petawatts. Esto se logra extendiendo el pulso temporal y espectralmente, luego amplificándolo y finalmente comprimiéndolo de nuevo.. 3

- **mode-locking:** Es una técnica para hacer que un láser emita pulsos de duración extremadamente corta, del orden de picosegundos o femtosegundos. Esto se logra generan- do interferencia constructiva entre los modos longitudinales de la cavidad de resonancia del láser.. 3
- **reflector de Bragg distribuido:** El reflector de Bragg distribuido, también conocido como espejo de Bragg, es una estructura reflejante que consiste de una secuencia alternante de capas de dos materiales ópticos diferentes[11]. 3
- **resonador de Fabry-Pérot:** El resonador de Fabry-Pérot es una cavidad óptica de resonancia que consiste en un arreglo de dos espejos paralelos que reflejan un haz de luz múltiples veces para amplificar la longitud del ca- mino óptico.. 3

#### BIBLIOGRAFÍA

- Faist, J; Capasso, F; Sivco, D. L; Sirtori, C; Hutchinson, A. L & Cho, A. Y. (1994) "Quantum Cascade Laser", Science 264.
- [2] Faist, J; Hofstetter, D; Muller, A & Beck, M. (2000) "Quantum cascade lasers: between intersubband physics and applications", *Procee- dings of SPIE* 3944.
- [3] DRS Daylight Solutions, página web de Daylight Solutions, Inc. URL: https://daylightsolutions.com/
- [4] Herriot, D. R; Schulte, H. J. (1965) "Folded Optical Delay Lines", *Applied Optics*, 4(8), 883-889.
- [5] Pecharromán-Gallego, R. (2017) "An Overview on Quantum Cascade Lasers: Origins and Development'. *Quantum Cascade Lasers, IntechOpen.*
- [6] Lozano Fontalvo, A. M. (2014) Diseño, construcción y prueba de un espectrómetro de absorción estimulada en cavidades ópticas. UNAM, Tesis de maestría.
- [7] "Herriott Cells for Multipass Absorption Spectroscopy", página web de *ThorLabs, Inc.* URL: https://www.thorlabs.com/ newgrouppage9.cfm?objectgroup\_id=12671
- [8] "Laser Resonator Modes", página web de Edmund Optics®. URL: https://www.edmundoptics.com/knowledge-center/ application-notes/lasers/laser-resonator-modes/
- [9] Henderson, B., Khodabakhsh, A., Metsälä, M., Ventrillard, I., Schmidt, F. M., Romanini, D., Ritchie, G., Te Lintel Hekkert, S., Briot, R., Risby, T., Marczin, N., Harren, F., & Cristescu, S. M. (2018). "Laser spectroscopy for breath analysis: towards clinical implementation". *Applied physics. B, Lasers and optics*, 124(8), 161. URL: https://doi.org/10.1007/s00340-018-7030-x
- [10] "Multipass Gas Cells", página web de RP Photonics Encyclopedia©. URL: https://www.rp-photonics.com/multipass\_gas\_cells.html
- [11] "Bragg Mirrors", RP Photonics Encyclopedia. URL: https://www.rpphotonics.com/bragg\_mirrors.html

# EFECTO KAPITZA - DIRAC

Eugenio Ley Koo Instituto de Física, UNAM

September 30, 2022

#### RESUMEN

Esta contribución para la Escuela de Verano de Física 2022 está enmarcada en el área de Fundamentos de Electromagnetismo y Mecánica Cuántica, y está enfocada en el trabajo de Kapitza y Dirac de 1933 titulado "*La reflexión de electrones por ondas de luz estacionarias*", y sus implementaciones experimentales con átomos después de medio siglo, y con electrones al inicio del nuevo siglo. En esta versión escrita para las Memorias de la Escuela, la sección introductoria revisa brevemente algunos de los experimentos e ideas que fueron cruciales para la formulación de la mecánica cuántica, en general, y de la propuesta de Kapitza y Dirac[1], en particular. La segunda sección resalta la parte novedosa de la propuesta en conexión con la emisión estimulada de radiación en el efecto. A continuación se describen los intentos de experimentos para producir y detectar el efecto con electrones, y cuyo objetivo se logró en 2001; en contraste, también se dan referencias sobre los experimentos con átomos realizados desde los 1980's. y versiones contemporáneas. La sección de Discusión y Conclusión destaca la complementariedad de la radiación electromagnética y la materia en sus interacciones y aplicaciones, ilustradas por el tránsito de la era electrónica a la era fotónica.

#### 1. INTRODUCCIÓN

Como se indica en el primer renglón del Resumen el tema de interés general es el de los fundamentos comunes del Electromagnetismo y la Mecánica Cuántica, y en el cual el efecto Kapitza-Dirac permite reconocer comportamientos comunes de luz y materia. Efectivamente, la luz y por extensión la radiación electromagnética fue la precursora de la Teoría de la Relatividad Especial y de la Mecánica Cuántica, pilares de la física del siglo XX. La naturaleza misma de la Luz fue interpretada en términos de corpúsculos por Newton y en términos de ondas por Huygens, dos siglos antes. En 1800 Young realiza el experimento de difracción de la luz al pasar a través de dos rendijas en una pantalla y formar un patrón de zonas alternadas iluminadas y oscuras en otra pantalla, argumentando que en Optiks de Newton se encuentran las evidencias del carácter ondulatorio de la luz. Desde luego, el fenómeno de

difracción fue descubierto por Grimaldi varias décadas antes del trabajo de Newton. Fue en 1820 cuando el fenómeno de difracción de la luz se acepta como prueba del comportamiento ondulatorio de la luz en las investigaciones de Fresnel y de Fraunhoffer; el último construye rejillas de difracción e identifica las líneas espectrales del sodio en la luz solar. Medio siglo después Maxwell propone su "Teoría Dinámica del Campo Electromagnético" en base de "Las Investigaciones Eléctricas Experimentales" de Faraday, y en el lenguaje matemático de ecuaciones diferenciales parciales, prediciendo la existencia de ondas electromagnéticas radiadas por cargas aceleradas. En 1887, Hertz produce tales ondas en su laboratorio en la modalidad de ondas estacionarias, de las que mide su longitud de onda, y conociendo la frecuencia del circuito de capacitancia e inductancia con que las produce, determina su velocidad de propagación, la cual coincide con la razón de las unidades de carga electromagnética y electrostática, y también con la velocidad de la luz. Se reconoce a la luz como ondas electromagnéticas visibles y se anticipan otras con frecuencias menores y mayores que las de las luces infrarroja y ultravioleta. En paralelo, Kirkhhoff y Bunsen, usando el mechero y el espectroscopio, identifican las radiaciones emitidas o absorbidas por vapores de diferentes elementos y compuestos químicos, identificando sus características de líneas y bandas, respectivamente, con longitudes de onda y frecuencias típicas de cada substancia. Kirkhhoff reconoce también una componente de radiación con un espectro continuo que varía según la temperatura, y que lo lleva a formular el problema de termodinámica de la radiación del cuerpo negro, y que consiste en encontrar la distribución de frecuencias o de longitudes de onda de la radiación a una temperatura dada.

Tres descubrimientos experimentales realizados por Roentgen de los Rayos X en Noviembre de 1895, de la Radioactividad por Becquerel en Febrero de 1896. y la identificación de los Rayos Catódicos como partículas eléctricamente cargadas por J.J. Thomson en 1897, plantearon problemas sobre la naturaleza de los procesos y productos involucrados en cada uno de ellos. Aquí, se revisan cada uno y se reconocen conexiones entre ellos. El tubo de rayos catódicos fue utilizado por Faraday para estudiar las descargas eléctricas y la luz emitidas en diferentes gases en su interior, en función de la diferencia de potencial entre el cátodo y el ánodo, y con diferentes presiones. Los rayos catódicos se descubrieron cuando las presiones se redujeron, y se detectaron vía la fluorescencia que producen en una pantalla más allá del ánodo al final del tubo. En vez de la pantalla, Roentgen puso un anticátodo para detener o desviar los rayos catódicos en 90° grados, y poniendo la pantalla fluorescente a una cierta distancia para detectar los productos; su sorpresa al aplicar voltajes de kilovolts fue que en la pantalla pudo ver la imagen de los huesos de su mano, y de su esposa. Reconoció que se trataba de un nuevo tipo de radiación, y la llamo Rayos X porque no sabía que eran. El escribió un reporte de sus experimentos y lo puso en el correo el 28 de Diciembre.

Perrin dio a conocer el reporte en la Academia Francesa en Enero. Becquerel pensó que podría ser un fenómeno de fluorescencia o fosforescencia, especialidad de su familia por tres generaciones. Decidió hacer experimentos usando una muestra de la colección de minerales de la familia Sulfato Doble de Uranio y Potasio: sometida a la luz solar, envuelta en papel y colocada junto a una placa fotográfica, la cual al ser revelada mostro la imagen de la muestra. Él presentó sus resultados preliminares en la Academia a principios de Febrero, incluyendo una explicación del fenómeno como fosforescencia. Reservó lugar para poder hablar sobre experimentos adicionales, en la próxima sesión de la Academia. Preparó sus muestras para someterlas a la radiación solar durante una semana o más, y después permitir que sus radiaciones impresionaran la placa fotográfica. Pero por ser Febrero el Sol no salió; de todos modos envolvió la muestra y la guardó junto con la placa fotográfica y la reveló: Su sorpresa fue mayor al ver que la impresión era más intensa que en la muestra irradiada previamente. En su reporte reconoció que no se trata de un fenómeno de fosforescencia, la muestra emite radiaciones espontáneamente: Radioactividad. Las preguntas naturales: Cuáles substancias, cuáles procesos y cuáles radiaciones intervienen? Las investigaciones de Becquerel, María Sklodowska, Pierre Curie, y Enrnest Rutherford iniciadas en ese momento respondieron cada una de ellas, y durante varias décadas sentaron las bases para el descubrimiento de nuevas formas de materia, nuevos procesos, y nuevas formas de radiaciones a lo largo del siglo.

Lennard fue reconocido como el experto de los ravos catódicos. El colaboró con Hertz y juntos descubrieron el efecto fotoeléctrico en el que la luz al incidir sobre una superficie metálica produce la emisión de una corriente eléctrica negativa. Lennard sostenía la opinión de que los rayos catódicos eran un fenómeno en el éter, implicando que era radiación electromagnética, pero sus investigaciones no lo llevaron a probarla. En 1897, J.J. Thomson puso en evidencia la naturaleza corpuscular de los rayos catódicos demostrando que tienen una carga negativa y una masa, al medir la razón entre ambas en un tubo de rayos catódicos, con un alto vacío, un condensador de placas paralelas entre el cátodo y el ánodo que produce un campo eléctrico uniforme perpendicular al trayecto de los rayos catódicos, forzándolos a describir una trayectoria parabólica. Thomson los llamó corpúsculos pero el nombre que perduró es el de electrón, y reconoció que se encuentran en diferentes situaciones: Los rayos. Becquerel tienen carga negativa, y la misma razón de carga a masa que los rayos catódicos. Thomson propuso su modelo del budín de ciruelas del átomo: Una esfera con carga positiva y masa uniformemente distribuidas y los electrones negativos y lígeros como ciruelas, siendo las cantidades de carga positiva y negativa iguales para asegurar la neutralidad del átomo. La ionización de los átomos está asociada a la separación o incorporación de electrones. La corriente fotoeléctrica negativa corresponde a la emisión de electrones por la luz incidente en el metal.

El análisis del movimiento de las nuevas radiaciones emitidas por substancias radioactivas, en presencia de campos eléctricos y magnéticos, permite identificar y distinguir partículas con cargas eléctricas positivas y negativas, y medir sus razones de carga a masa; y también reconocer que las radiaciones que no se desvían son eléctricamente neutras. Los llamados rayos alfa, beta y gama por Rutherford, en base a sus poderes de penetración crecientes en materia son positivos y masivos, negativos y ligeros, y neutros, respectivamente; sus poderes de ionización de la materia son decrecientes. Los rayos X y los rayos gama no tienen carga eléctrica, son altamente penetrantes en materia y su poder de ionización es menor que las de los rayos alfa y beta. En conexión con los rayos X se plantea la pregunta ondas o partículas? y hay observaciones experimentales que favorecen ambas respuestas.

En 1900, Planck introduce la hipótesis cuántica de que la energía intercambiada entre la radiación electromagnética y la materia a una temperatura dada es un múltiplo entero del

cuanto de luz proporcional a la frecuencia  $f : \Delta E = nhf$ , n = 1, 2, 3, ..., h es la constante de acción, en su deducción de la distribución de frecuencias de la radiación de cuerpo negro. Las mediciones de dicha radiación en laboratorios de sus colegas en la Universidad de Kiel a bajas y altas frecuencias conducen a los valores de h, carga del electrón e, numero de Avogadro N de moléculas/mol, y R/N = k Constante de Boltzmann en términos de la constante de los gases ideales R, energía/(molKelvin).

En 1905, Einstein propone su propia versión de la hipótesis cuántica, los principios de relatividad y de constancia de la velocidad de la luz en sistemas inerciales, y sobre el movimiento Browniano y los experimentos de sedimentación para poner en evidencia la existencia de átomos. En la primera él argumenta que los fenómenos de fluorescencia y fosforescencia se entienden mejor si se acepta que el cuanto es una propiedad de energía de la luz misma, y también permite explicar el efecto fotoeléctrico incluyendo la existencia de un umbral de energía mínima para producirlo, y prediciendo una dependencia lineal de la energía cinética del fotoelectrón con la frecuencia. Esta propuesta revivía la descripción corpuscular de la luz que sus contemporáneos no estaban dispuestos a aceptar. Millikan realizó mediciones del efecto fotoeléctrico de 1911 a 1914, determinando la constante de Planck como la pendiente de las energías cinéticas de los fotoelectrones en función de la frecuencia, y aceptando la validez de la ecuación de Einstein, pero no de su hipótesis. Bohr en su modelo del átomo de Hidrógeno de 1913 adoptó la versión de Planck de la hipótesis cuántica.

En esa década también, Barkla reporta en 1904 sus experimentos de dispersiones sucesivas de ravos X que ponen en evidencia sus propiedades de polarización como la de la luz, y en consecuencia de ser radiación electromagnética, con frecuencias tres o cuatro órdenes de magnitud mayor que la de la luz y longitudes de onda menores del orden de cienmillonésimos de centímetro. Por otra parte, los trabajos de Roentgen y otros indican que los Rayos X, en su producción en el anticátodo y en su detección en pantallas fluorescentes o placas fotográficas, muestran intercambios de energía localizados espacial y temporalmente, comportándose como partículas. Para 1912, von Laue reconoce que un cristal puede sevir como una rejilla de difracción tridimensional, y que la distancia entre sus átomos puede poner en evidencia el carácter ondulatorio de los ravos X, incluvendo la medición de sus longitudes de onda. Friedrich y Kniping implementan tal experimento en cristales de sulfato de cobre en que los rayos X inciden normalmente y se detectan zonas localizadas de máxima intensidad de la radiación retrodifractada en placa fotográfica, equidistantes del eje e igualmente espaciadas alrededor del mismo. En 1913 en Cambridge, William Henry Bragg y William Lawrence Bragg inician sus investigaciones cristalográficas de difracción de rayos X; Lawrence propone la fórmula matemática que determina las direcciones de máxima difracción  $n\lambda = 2d \operatorname{sen}(\theta)$ , en que la interferencia es constructiva, siendo n el orden de difracción,  $\lambda$  la longitud de onda, d la separación entre planos del cristal, y  $\theta$  el ángulo del haz incidente y del haz difractado con respecto a la normal a los planos. Ésta fue la pieza clave para la planeación de los experimentos y la interpretación de sus resultados. Mientras estas investigaciones demostraron las propiedades ondulatorias y su identificación como radiación electromagnética de los rayos X, su comportamiento corpuscular observado estaba pendiente de ser explicado. Para 1914, Barkla y Moseley usan el modelo de Bohr del átomo de Hidrógeno para identificar

y sistematizar la emisión de Rayos X de los elementos a lo largo de la Tabla Periódica.

Einstein completó su trabajo de la Teoría de la Relatividad General en 1915, y en 1916 reactivó su interés en la radiación de cuerpo negro proponiendo su deducción de la distribución de Planck, en base del modelo de dos niveles para el sistema atómico con ocupaciones de distribución de Boltzmann, y suponiendo procesos de emisión espontánea, emisión estimulada y absorción estimulada por radiación resonante entre los dos niveles, con coeficientes A, B y C para las probabilidades de los procesos respectivos, y dependientes de la distribución de Planck los procesos estimulados. La condición de equilibrio termodinámico del sistema completo de radiación y materia determina los coeficientes con la igualdad de B y C, y su conexión con A y con la distribución de Planck.

En 1922 Bose hizo su propia deducción de la distribución de Planck suponiendo que la radiación es un gas de partículas de luz, cada una con energía de un cuanto  $\epsilon = hf$  y cantidad de movimiento p = hf/c, usando la hipótesis cuántica de Einstein y su teoría de relatividad especial, y los métodos de la física estadística de Boltzmann. Al enviar su artículo para publicación en Inglaterra, el Editor lo rechazó. Entonces Bose se lo envió a Einstein solicitando que lo leyera, y si lo consideraba correcto que consiguiera que alguien lo tradujera al Alemán, y lo enviara a publicación en Zeitsschrift für Physik. Einstein lo leyó, lo entendió, lo tradujo él mismo, y lo envió a publicación a esa revista con una nota: "Éste es un avance importante. Ya he examinado su aplicación al caso de átomos sobre la que reportaré próximamente". En ese reporte adicional Einstein describe lo que se conoce como la condensación de Bose-Einstein, y la Estadística de Bose-Einstein como la primera forma de Estadística Cuántica.

En 1923 Arthur Compton realiza experimentos de dispersión de rayos X, y explica sus resultados haciendo las mismas suposiciones que Bose sobre la energía y cantidad de movimiento de la radiación, suponiendo que en la dispersión se conservan la energía y la cantidad de movimiento: sus mediciones de el cambio de la longitud de onda de la radiación dispersada, y las distribuciones angulares de los electrones y rayos X dispersados son consistentes con dichas suposiciones.

En 1923 Louis de Broglie considera que si la radiación electromagnética exhibe propiedades ondulatorias y corpusculares, ¿no será posible que la materia, como átomos, electrones, y núcleos atómicos, también exhiban propiedades ondulatorias?. En particular, él quiere entender la razón del Postulado usado por Bohr para seleccionar sus órbitas estacionarias en el Átomo de Hidrógeno:  $mvr = nh/(2\pi)$ , siendo m la masa del electrón, v su velocidad, y r el radio de su órbita circular; además mv = p es su cantidad de movimiento y su producto con el radio es el momento angular con unidades de acción como la constante de Planck h, y  $n = 1, 2, 3 \dots$ indica su cuantización. De Broglie reescribe  $2\pi r = nh/p = n\lambda$ , identificando la longitud de onda asociada al electrón  $\lambda = h/p$ , y la condición de que en la periferia del círculo se tenga un número entero de longitudes de onda para que la onda sea estacionaria. Nótese que en el tercer renglón del párrafo sobre el trabajo de Bose se tiene la misma relación para la radiación electromagnética.

La formulación de la Mecánica Cuántica se dio hasta que se reconoció que la radiación

electromagnética exhibe ambos comportamientos ondulatorio y corpuscular, y que la materia también exhibe propiedades corpusculares y ondulatorias. Para la segunda, la comprobación experimental se dio también en 1927 por experimentos de Davisson y Germer de difracción de un haz de electrones incidente en la cara (1,1,1) de un cristal de Niquel, y los experimentos de G.P. Thomson, hijo de J.J., de difracción de un haz de electrones al atravesar una pantalla cristalina produciendo un patrón de difracción circular en otra pantalla. Ruska inventó el microscopio electrónico en 1934, como una herramienta complementaria en investigaciones cristalográficas. En 1947 se inició también el desarrollo de la difracción de neutrones en Reactores Nucleares. Posteriormente, también se contó con microscopios iónicos con resoluciones tres órdenes de magnitud mayores que los electrónicos.

La radiación electromagnética se ha utilizado para explorar y analizar una gran diversidad de materiales y de procesos; y los electrones, rayos alfa, átomos y iones, núcleos atómicos, protones, neutrones, y partículas elementales también. La mayoría de los trabajos revisados en esta sección fueron merecedores del Premio Nobel, y se recomienda al lector la lectura de las conferencias respectivas, para apreciar cada problema en su momento y los avances logrados con su explicación y entendimiento.

#### 2. EFECTO KAPITZA-DIRAC

#### 2.1 El Trabajo Original

La propuesta de la referencia [1] es complementaria de los trabajos de difracción de luz en rejillas de difracción y de rayos X en cristales, al proponer el estudio de la difracción de electrones en ondas estacionarias de luz. En el primer párrafo del artículo se cita el trabajo de Lipmann en conexión con la fotografía de color, en que el Autor produjo una emulsión fotográfica periódica que produce difracción de luz de diferentes colores a diferentes ángulos, y Kapitza y Dirac argumentan que también se podría difractar electrones con las correspondientes longitudes de onda de de Broglie. A continuación, ellos reconocen que sería aún más interesante difractar electrones directamente en una onda de luz estacionaria, adelantando que del análisis que se presenta la realización experimental está en el límite de poder hacerse y es muy difícil; pero el punto de interés principal de la propuesta reside en la posibilidad de observar radiación dispersada estimulada.

En los párrafos subsecuentes se describe el arreglo experimental para producir las ondas de luz estacionarias, el análisis de la difracción de los electrones a la Bragg; y en la forma alternativa de considerar que la onda estacionaria es la superposición de ondas contrapropagantes, cuyos fotones son simplemente absorbidos y emitidos en forma estimulada intercambiando energía y cantidad de movimiento en sus respectivas dispersiones Compton con el electrón. También se hace el análisis de la dependencia de cada proceso en función de la intensidad de la luz incidente,  $I_0$  energía por unidad de área y por unidad de tiempo, de la luz dispersada,  $I_{\omega}$  energía por unidad de área por unidad de tiempo, y de la luz estimulante,  $I'_{\omega\nu}$  energía por unidad de área por unidad de ángulo sólido por unidad de tiempo y por unidad de rango de frecuencia y sus conexiones sucesivas. Adicionalmente, se hacen las estimaciones numéricas para electrones con energías de 25 eV, luz verde característica de mercurio, $\lambda = 5460 \times 10^{-8}$  cm y anchura espectral  $\Delta \lambda = 0.1 \times 10^{-8}$  cm, que conducen a que uno de cada  $10^{14}$  electrones será reflejado con un ángulo de 0.05 grados entre el haz incidente y el haz difractado.

La Figura en la primera página del artículo ilustra el arreglo experimental para producir las ondas estacionarias de la luz emitida por una fuente de luz O en la parte media superior al atravesar una lente convexa plana horizontal D, convirtiéndose en un haz paralelo vertical y que se refleja en el espejo horizontal C de longitud l; el patrón de luz estacionario es la superposición de los ondas que bajan y suben cuando hay un múltiplo entero de medias longitudes de la luz entre las dos superficies planas horizontales y frentes de onda nodales con esa misma periodicidad. En la parte inferior de la Figura, a la altura de la región donde se encuentra la luz estacionaria se muestra en A la posición de la fuente de electrones, un diafragma B con un potencial V para acelerar los electrones en línea recta y hacia abajo en la dirección de E y con un ángulo  $\theta$  con respecto al eje vertical. La difracción se manifiesta en la reflexión del electrón que sale en la dirección de E/ a la derecha y arriba de la horizontal formando también un ángulo  $\theta$  con el eje vertical. Nótese que ahora el espaciamiento de la rejilla de luz es media longitud de la luz, y la longitud de onda de los electrones está definida como la longitud de onda de de Broglie a = h/p, y están conectadas por la fórmula de Bragg.

En el siguiente párrafo se presenta la explicación alternativa de simple absorción de un fotón que sube por el electrón cambiando su cantidad de movimiento de abajo hacia arriba y su energía, y de emisión estimulada de un fotón hacia abajo con cambio adicional e igual de la cantidad de movimiento del electrón, e intercambio de energía del electrón al fotón. En ambos procesos hay conservación de energía y cantidad de movimiento entre electrón y fotones. El electrón cambia de dirección y de cantidad de movimiento en la dirección vertical:  $2h\nu/c = 2(h/a)\cos\theta$ , que es equivalente a la ley de Bragg  $a = 2c/2\nu\cos\theta = 2(\lambda/2)\cos\theta$ , para la longitud de onda del sistema difractado y el espaciamiento de la rejilla luminosa para n = 1.

El párrafo subsecuente describe los procesos sucesivos empezando con la Ec. (1), que describe la conexión entre las intensidades del haz incidente hacia arriba  $I_0$  y del haz retrodispersado hacia abajo por un electrón  $I_{\omega}$ , mediante la fórmula de Thomson con el cuadrado del radio clásico del electrón como sección transversal. El paso de dispersión simple a dispersión estimulada requiere multiplicar el lado derecho de la Eq.(1) por el factor  $(c^2/2h\nu^3) I'_{\mu\nu\nu}$ tomando en cuenta la densidad de estados con frecuencia  $\nu$ , para luz no polarizada. Bajo la suposición de que el haz estimulante cubre un ángulo sólido pequeño  $d\omega$ , entonces el haz dispersado también cubre el mismo ángulo y su energía total por unidad de tiempo  $I_{\omega}d\omega$ se reescribe en términos de  $I'_{\omega\nu}d\omega = I'_{\nu}$ , energía del haz estimulante por unidad de área por unidad de tiempo y por unidad de rango de frecuencia. La Ec.(2), describe la energía total por unidad de tiempo, proporcional a  $I_0 I'_{\nu}$  con constante de proporcionalidad producto de sección transversal de Thomson y densidad de estados de frecuencia  $\nu$ . Finalmente, si se divide esa energía entre la energía de un fotón  $h\nu$  se obtiene la probabilidad de ocurrencia de la dispersión estimulada por unidad de tiempo para un electrón. El tiempo que el electrón con velocidad v permanece dentro de la zona de longitud l de la luz estimulada es l/v, y la Ec.(3) da la probabilidad total de que el electrón sea deflectado con los factores de proporcionalidad adicionales. Aquí se complementan los datos numéricos de  $v = 3 \times 10^8 \ cm/s$ ,  $l = 10 \ cm$ , para una intensidad de la línea espectral escogida de una lámpara de arco de mercurio por cm cuadrado del espejo de 1 watt  $(10^7 erg/seg)$ , que condujeron a concluir que un electrón por cada  $10^4$  se esperaba que fuera deflectado 0.05 grados.

2.2 Observación de la difracción de electrones por ondas de luz estacionarias, Batelaan (2001)

La observación experimental del efecto Kapitza-Dirac con electrones, como fue propuesto originalmente por sus autores, se intentó desde la década de los 1980's, pero fue hasta el nuevo siglo que se reunieron las condiciones para lograrlo como se reportó en la referencia [2]. Efectivamente, la Figura 1 de esta referencia muestra esquemáticamente el arreglo experimental que hizo posible la implementación y comprobación del efecto: Los electrones son colimados por cuatro rendijas de molibdeno y se difractan en una onda estacionaria de luz formada por dos haces de láser contrapropagantes entre dos lentes, y son detectados y analizados a la derecha. Los electrones se describen como una onda mecánica cuántica mientras que la onda estacionaria de luz actúa como una rejilla. El texto describe las características del láser con que se alcanzan las intensidades necesarias y la coherencia de la onda estacionaria, y la producción y control del haz de electrones mediante tres rendijas antes de su difracción, y la cuarta después de la misma y antes de su detección y análisis.

El láser utilizado es de Nd: YAG con pulsos de 10ns y una energía de 0.2J por pulso enfocado en una cintura de haz con  $125 \ micras$  de diámetro. Cada haz láser contrapropagante viaja la misma distancia sin diferir en más de  $1 \ mm$ , lo cual está dentro de la longitud de coherencia del haz láser (5mm) donde se forma la onda estacionaria.

Un haz de electrones de 380 eV se colima mediante dos rendijas en molibdeno de 10 micras de anchura y separadas 24 cm. Una tercera rendija corta la altura del haz de electrones al tamaño de la cintura del haz láser. A continuación, el haz de electrones cruza la onda estacionaria alrededor de 1 cm después de la tercera rendija. Una cuarta rendija de 10 micras, a 24 cm después de la región de interacción, se usa para barrer el perfil del haz de electrones. La anchura espacial medida (anchura completa a la mitad del máximo, FWHM en Inglés) del haz de electrones es 25 micras. Ésta es una anchura considerablemente menor que la distancia esperada entre los órdenes de difracción cero y primero, 55 micras =  $(2\lambda_{dB}/\lambda_{opt}) \times 24cm$  en términos de las longitudes de onda del electrón y de la luz láser 532 mm, respectivamente. De este modo, se espera que los picos de difracción se puedan resolver. Los electrones se detectan como una función del tiempo con un multiplicador de electrones. Cada pulso láser se usa como una señal de inicio, y la detección de electrones se usa como el final de la señal para un convertidor de tiempo a amplitud. Un escalador multicanal registra los pulsos del convertidor a espectros de tiempos de coincidencia. De los espectros de tiempo tomados en varias posiciones se obtiene directamente el patrón de difracción.

La Figura 2 muestra los datos experimentales de los conteos de electrones por segundo y por canal como función de la posición del detector en micras. Los puntos negros de los datos se comparan con soluciones de la ecuación de Schrödinger en línea continua con un acuerdo

razonable, y muestran claramente picos de difracción por primera vez. También se muestra el perfil del haz de electrones cuando el láser se apaga.

El artículo discute algunos de los intentos anteriores de implementar la propuesta de Kapitza-Dirac de 1933, y el lector interesado puede revisarlas. También anticipan aplicaciones futuras. 1) El efecto Kapitza-Dirac proporciona separadores de haces de electrones, en base a los cuales se puede armar un interferómetro tipo Mach-Zender. 2) El efecto K-D con átomos ha servido para mostrar que el movimiento de átomos a través de una onda estacionaria de luz representa un ejemplo de caos clásico y cuántico. El trabajo reportado en este artículo muestra que el mismo régimen se puede alcanzar con los electrones. La carga del electrón proporciona un medio conveniente de investigar el efecto de interacciones externas sobre el comportamiento cuántico caótico. 3) La intensidad del láser se puede aumentar a  $10^{15} W/cm^2$  con pulsos de 100 picosegundos, intensificando el campo magnético del láser e incorporando efectos de espín del electrón, y a  $10^{18} W/cm^2$  incorporando efectos relativistas del electrón.

Se puede apreciar que la observación experimental reportada se basó en la disponibilidad de láseres pulsados con mayor intensidad y coherencia, y de sistemas de control y detección de los electrones, en comparación con la lámpara de arco de mercurio y la instrumentación electrónica en 1933.

2.3 Referencias sobre observación de difracción de átomos por ondas de luz estacionarias.

Esta Subsección comenta brevemente sobre las referencias [3-9] que illustran versiones sucesivas del Efecto Kapitza-Dirac con átomos observadas desde los 1980's, y más recientes. Desde aquí invitamos al lector a reconocer los elementos comunes y las diferencias en los títulos de los artículos.

La referencia [3] es un artículo de enseñanza y revisión, que incluye una Introducción sobre [1], Fig.1, y su implementación en átomos, Fig.2, distinguiendo la dispersión de Bragg y la difracción, Fig.3 en cantidad de movimiento-posición, y Fig.4 en energía-tiempo; y un espacio de parametrización en Fig.5 con las regiones donde dominan esos procesos, y la canalización, La Sec.3 describe los potenciales de corrimiento de luz y ponderomotivo para átomos y electrones en ondas de luz estacionarias. La Sec. 4 Teoría de Difracción para longitud de onda de de Broglie comparable al período del potencial requiere un tratamiento cuántico, resolviendo la Ec.(8) de Schrödinger, con una función que es la superposición de ondas planas con números de onda nk, Ec.(9). Los coeficientes de la superposición son funciones de Bessel de orden n/2 con argumento  $V_0 t/\hbar$ , Ec.(11), o funciones coseno o seno con argumento un cuarto del anterior, Ec.(12), para difracción y dispersión de Bragg, respectivamente. Las Figuras 7 ilustran las poblaciones respectivas para energía de electrones de 10 eV, y anchuras de cintura de 0.005 y 0.5 cm, respectivamente, en función de intensidades del láser altas y bajas. La Sec. 5 Parámetros Experimentales Sugeridos empieza con la discusión de por qué no se había podido observar el Efecto Kapitza-Dirac con electrones. La Tabla 1 presenta los datos asociados a los átomos y haces de luz láser estacionaria de la Fig. 5 y las referencias respectivas.

La Tabla 2 incluye los parámetros de difracción de alta intensidad de átomos y iones en estados base, y excitados con sus vidas medias, y sus longitudes de onda; la longitud de onda de la luz de láser de Argon 488 nm, enfocada en una anchura de 100 micras y una altura de 1 mm, su intensidad  $10^7 W/m^2$ , y el producto de la magnitud del potencial de corrimiento de luz y el tiempo de interacción que para un valor cercano a 1 indica que el número de partículas difractadas es una fracción significativa del número total de partículas incidentes.

Para átomos es posible realizar experimentos cerca de resonancia con luz láser de decenas de mW como se muestra en la Figura 9, que ilustra datos experimentales para difracción de Bragg y difractiva en las gráficas de números de átomos vs cantidad de movimiento del átomo. La Tabla 3. incluye los parámetros propuestos para la observación experimental de la difracción de electrones.

La Sec 6 sobre interferometría parte del principio de la misma, en términos de corrimientos de fase en los brazos y de longitudes de onda cortas, que hacen posible diversas aplicaciones con alta precisión.

6.1 En Interferometría atómica y electrónica, la dispersión de Bragg y la difracción separan el haz incidente en dos o más partes coherentes, Fig. 9. Este tipo de separador de haces es la base de un Interferómetro Mach-Zender para una onda de materia con una longitud de onda de  $10^{-9}m$ , mil veces menor que la de un interferómetro de luz, que se ilustra en la Fig. 10, usando tres ondas de luz estacionarias para separar y recombinar un haz atómico, del que se muestran los patrones de difracción medidos a la salida de los dos haces 1 y 2 en cuentas de átomos/seg vs. posición de la tercera onda de luz estacionaria mostrando conservación del número de partículas; la frecuencia de la luz se escogió cerca de la resonancia.

6.2 Sensibilidad como sensor de rotación se ilustra en la Figura 11 para un deflector de Moire, tres tipos de giroscopos (fibra y anillo, avión comercial, el mejor de láser), y cinco interferómetros (el mejor atómico, el atómico del autor, de neutrones, de electrones, de átomo de Ca tipo Ramsey).

6.3 Direcciones futuras. 6.3.1 Amplificación. La Fig.12 plantea si el área limitada por los dos brazos de un Interferómetro Mach-Zender de electrones o fotones se puede hacer más grande mediante lentes electrostáticas u ópticas entre las rejillas. 6.3.2 Interferometría de iones para poner a prueba la mecánica cuántica usando el efecto Aharonov-Bohm se ilustra en la Fig.13. Los iones excitados se difractan y pasan por uno u otro de dos campos coherentemente oscilantes con fase relativa  $\delta$  antes de recombinarse y ser detectados. El efecto del flujo magnético dentro del área limitada por los trayectos se puede observar ya sea en el conteo de los iones o en la fluorescencia en resonancia del ión. 6.3.3 Interferometría Molecular plantea preguntas sobre qué tan grande puede ser una molécula para todavía mantener coherencia en su trayecto por el interferómetro, pero también sugiere que pueden ser apropiadas para realizar estudios de decoherencia, y también detectar efectos gravitacionales como se ha hecho con interferómetros de neutrones, y adicionalmente detectar diferencias entre moléculas quirales.

La lectura de [3] es útil para apreciar los logros en las observaciones de Pritchard y colaboradores al observar la difracción de átomos de sodio en la onda estacionaria de luz

láser cerca de resonancia [4], y de la dispersión de Bragg de los mismos átomos en una onda estacionaria de luz [5], como los trabajos pioneros que validaron la propuesta de Kapitza-Dirac. También se puede apreciar que el experimento reportado en [6] para electrones de energías menores de 20 eV dispersados por una onda óptica estacionaria con intensidades de  $10^{13}$  a  $10^{14}W/cm^2$  con transferencias muy altas de cantidad de movimiento de la rejilla óptica a los electrones,  $1000 \ \hbar k$  es la contraparte de dispersión de Bragg, pero no de difracción, como se señaló en [2-3].

Las referencias [7-8] ilustran aplicaciones adicionales del efecto Kapitza-Dirac en átomos, y su implementación en cristales fotónicos en [9].

#### 3. DISCUSIÓN Y CONCLUSIÓN

En esta contribución, la Introducción revisa algunos de los problemas sobre la radiación electromagnética, la estructura de la materia, y sus interacciones que llevaron al desarrollo de la Mecánica Cuántica y de la Teoría de la Relatividad, en el primer cuarto del Siglo XX. La primera se formuló hasta que se reconoció que la radiación electromagnética exhibe su comportamiento ondulatorio descrito por las ecuaciones de Maxwell, y también intercambia energía y cantidad de movimiento con la materia en forma localizada espacial y temporalmente según la hipótesis cuántica de Einstein; y que la materia también exhibe un comportamiento ondulatorio según la hipótesis de de Broglie, comprobada por los experimentos de difracción de electrones en cristales por Davisson y Germer, y por G. P. Thomson, y base física de la Ecuación de Onda de Schrödinger. En la mecánica cuántica las formas elementales de radiación electromagnética y de materia tienen descripciones comunes y complementarias, en términos de longitudes de onda y frecuencias, y de eigenfunciones y eigenvalores de sus propiedades dinámicas.

La Sección sobre el Efecto Kapitza-Dirac revisa el trabajo original, describe las observaciones de la versión de difracción de electrones por ondas de luz estacionarias, e ilustra las observaciones anteriores y recientes de difracción de átomos por ondas de luz estacionarias, con una muestra de algunas referencias.

Las radiaciones electromagnéticas y la materia se han utilizado para analizar la materia. La materia también se ha utilizado para explorar y analizar radiaciones electromagnéticas.

### Referencias

- P.L. Kapitza and P.A.M. Dirac, The reflection of electrons from standing light waves. Proc. Camb. Phil. Soc. 29, (1933) 297-300.
- [2] D.L. Freimund, K. Aflatooni and H. Batelaan. Observation of the Kapitza Dirac effect. Letters to Nature. NATURE VOL. 413 Sept.13, 2001, 142-143.
- [3] H. Batelaan, The Kapitza-Dirac effect, Contemporary Physics. 41:6, (2000) 369-381, DOI: 10.1080/00107510010001220.

- [4] P.L. Gould, G.A. Ruff, D.E. Pritchard, Diffraction of Atoms by Light: The near resonant Kapitza-Dirac Effect. Phys. Rev. Lett. 56 (8), (1986) 827-830.
- [5] P.J. Martin, B.G. Oldaker, A.H. Miklich, D.E. Pritchard, Bragg Scattering of Atoms from a Standing Light Wave. Phys. Rev. Lett. 60, (1988) 515-518.
- P.H. Bucksbaum, D.W. Shumacher, M. Bashansky, *High intensity Kapitza-Dirac effect*. Phys. Rev. Lett. 61(10), (1988) 1882-1885.
- [7] S.A. Gupta, W. Leanhardt, A.D. Gronin, D.E. Pritchard, Coherent manipulation of atoms with standing light waves. C.R. Acad. Sci. Paris, 2(3), (2001) 479-495.
- [8] H. Müller, S. Chiow, S. Chu, Atom wave diffraction between the Raman-Nath and the Bragg regime: Effective Rabi frequencies, losses and phase shifts. Phys. Rev. A77 923609, (2008) 1-17.
- [9] I. Ramos-Prieto, K.Uriostegui, J. Recamier, F. Soto-Eguibar, H. Moya-Cessa, *Kapitza-Dirac photonic lattice*. Optics Letters. Vol. 46, No 18, (2021) 4691 – 4693 https://doi.org/10.1364/OL.437829

# Cálculo de propiedades ópticas de metamateriales<sup>\*</sup>

Merlyn Jaqueline Juárez-Gutiérrez y W. Luis Mochán Instituto de Ciencias Físicas

22 de febrero de 2023

#### Abstract

We present an introduction to metamaterials, some of their optical properties, and examples of their uses. We develop an efficient theory for the calculation of the macroscopic permittivity of binary systems and systems with more components, in the non-retarded case and in the general case, and we present its implementation in a computational package and illustrate its use. We discuss some applications regarding the design of optimized nanostructured optical devices and we discuss the linear and non-linear properties obtained.

#### Resumen

Presentamos una introducción a los metamateriales, algunas de sus propiedades ópticas y ejemplos de sus usos. Desarrollamos una teoría eficiente para el cálculo de su permitividad macroscópica en sistemas binarios o con más componentes, en el caso no retardado y en el caso general, y presentamos su implementación en un paquete computacional y su uso. Finalizamos discutiendo algunas aplicaciones del mismo para el diseño de dispositivos ópticos nanoestructurados optimizados y discutimos las propiedades lineales y no lineales obtenidas.

# 1 Introducción

Un metamaterial es un material artificial formado por dos o más materiales alternados. Los metamateriales se pueden definir como un arreglo de elementos estructurales artificiales, diseñados para alcanzar propiedades electromagnéticas ventajosas e inusuales[1], de acuerdo al Virtual Institute for Artificial Electromagnetic Materials and Meta-Materials. Dichas propiedades están determinadas por sus constituyentes básicos, a los que se denomina ocasionalmente como meta-átomos, los cuales son objetos hechos de materiales usuales, así como por su forma y disposición, y pueden ser muy distintas a las de los materiales que los conforman, llegando a a ser

<sup>\*</sup>Curso presentado en la XXVIII Escuela de Verano en Física, ICF- e IF-UNAM, Cuernavaca, Mor. y Cd de México, junio 21-julio 2, 2021



Figura 1: Acumulación de carga Q en cierta región  $\mathcal{R}$  dentro de un conductor homogéneo, rodeada por una superficie  $\Sigma$  sobre la cual se aplica la ley de Gauss al campo producido por Q, campo que produce una densidad de corriente que fluye a través de  $\Sigma$ . La corriente modifica Q conforme transcurre el tiempo t produciendo oscilaciones de plasma.

muy exóticas. Pueden ser diseñadas y entonadas escogiendo las formas, estructuras internas, tamaños, orientaciones mutuas, etc., de sus meta-átomos. Sus funciones repuesta pueden ser modificadas mediante señales externas e internas y pueden ser controladas mediante microprocesadores programables.<sup>[2]</sup>

### 1.1 Materiales plasmónicos

Si un metamaterial tiene componentes metálicos, estos pueden presentar resonancias asociadas a los movimientos oscilatorios colectivos de sus electrones de conducción, denominados de acuerdo a sus características como plasmones de bulto, de superficie o localizados. La frecuencia de estos movimientos en un sistema infinito se denomina como frecuencia de plasma  $\omega_p$ . Para estimarla, considere el modelo más simple de un conductor, un gas de electrones que en equilibrio tienen una densidad de número  $n_0$ , y que son libres de moverse en un entorno positivamente cargado, de manera que el sistema en equilibrio sea neutro. Si debido a alguna compresión o rarefacción del gas de electrones se produjera una acumulación de carga Q localizada en alguna región  $\mathcal{R}$ , ésta produciría un campo eléctrico  $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ , como ilustra la figura 1. De acuerdo a la segunda ley de Newton, los electrones adquirirían una aceleración  $d^2 \mathbf{r}/dt^2 = -e\mathbf{E}(\mathbf{r},t)/m$ , donde m y -e son la masa y la carga eléctrica. La velocidad adquirida por los electrones resultaría en una corriente eléctrica  $\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = -n_0 e \mathbf{v} = -n_0 e (d\mathbf{r}/dt)$  que obedece la ecuación de movimiento,  $\partial \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)/\partial t = -\frac{n_0 e^2}{m} \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ . Integrando la ecuación diferencial de la corriente sobre una superficie  $\Sigma$  que rodee completamente la carga y usando la ecuación de continuidad y la Ley de Gauss para el campo eléctrico obtenemos una ecuación diferencial para la carga Q encerrada en  $\Sigma$ ,

$$\frac{d^2Q}{dt^2} = -\frac{4\pi n_0 e^2}{m}Q,$$
(1)



Figura 2: Oscilador armónico de masa m y constante k en su posición de equilibrio y desplazado una distancia y.

la cual es una ecuación diferencial idéntica a la de un oscilador armónico simple como el que se ilustra en la fig. 2. Sustituyendo la Ley de Hooke F = -ky en la segunda ley de Newton ma = F para un oscilador con constante k y masa m, obtenemos [3]

$$\frac{d^2y}{dt^2} = -\omega^2 y,\tag{2}$$

donde  $\omega = \sqrt{k/m}$ , y cuya solución,  $y(t) = y_0 \cos(\omega t + \phi_0)$  es un movimiento periódico con una frecuencia  $\omega$  que depende de k y m. Comparando las ecs. (1) y (2) notamos que puede existir carga en el seno de nuestro metal modelo, pero ésta oscilaría con la *frecuencia de plasma*  $\omega_p$  dada por

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi n_0 e^2}{m}.\tag{3}$$

La repulsión mutua entre electrones los impulsa lejos de regiones en que haya una densidad electrónica excedente, por arriba de su valor nominal. El movimiento consecuente prosigue aun después de que el sistema se neutraliza debido a la inercia electrónica, que los hace proseguir su camino hasta que en la región original disminuye tanto la densidad de electrones que aparezca una carga neta positiva que frena a los electrones en fuga y los hace regresar, hasta que su repulsión mutua los frena, habiendo regresado a la configuración inicial. Este proceso se repite periódicamente y su frecuencia  $\omega_p$  está relacionada con la repulsión coulombiana, proporcional a  $e^2$ , la densidad de número electrónica  $n_0$  y la inercia electrónica caracterizada por m.

En lugar de un medio infinito, consideremos ahora un medio semiinfinito separado del vacío por una superficie plana. Un análisis análogo nos permite obtener la frecuencia del *plasmón de superficie*, considerando ahora un exceso de carga Q en una región  $\mathcal{R}$  en la interfaz, como ilustra la fig. 3, el cual produce un campo eléctrico  $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$  que induce corrientes en el conductor.

Usando la ecuación dinámica de la densidad de corriente podemos escribir la ecuación dinámica de la carga como hicimos en el caso del plasmón de bulto, con la diferencia que la densidad de corriente en este caso sólo fluye a través de la mitad



Figura 3: Región  $\mathcal{R}$  en la superficie de un conductor semi-infinito en la que hay una carga Q, la cual produce un campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$  (líneas azules) y éste a su vez produce una densidad de corriente (líneas verdes) que atraviesan aquella parte de la superficie lejana  $\Sigma$  que se halla dentro del conductor.

 $\Sigma/2$  de la superficie  $\Sigma$  que se halla en el interior del metal,

$$\frac{d^{2}}{dt^{2}}Q = -\int_{\Sigma} d\boldsymbol{a} \cdot \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{j},$$

$$= ne \int_{\Sigma/2} d\boldsymbol{a} \cdot \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{v},$$

$$= \frac{1}{2} \frac{ne^{2}}{m} \int_{\Sigma} d\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{E},$$

$$= -\frac{2\pi ne^{2}}{m} Q.$$
(4)

Comparando esta ecuación con la ec. (2) identificamos la frecuencia del *plasmón de* superficie  $\omega_{sp}$ , dada por

$$\omega_{sp}^2 = \frac{2\pi n e^2}{m} = \frac{\omega_p^2}{2}.$$
(5)

En lugar de un sistema semiinfinito, consideremos ahora un sistema finito consistente en una partícula metálica separada del vacío por una superficie esférica. Supongamos que perturbamos esta esfera moviendo todos sus electrones una separación  $\boldsymbol{\zeta}$  respecto a su posición de equilibrio, lo cual induce una polarización  $\boldsymbol{P} = -n_0 e \boldsymbol{\zeta}$ , como ilustra la fig. 4, El desplazamiento de los electrones hacia uno de los hemisferios de la esfera genera un exceso de carga negativa en su superficie y un exceso de carga positiva en el otro, descrita por la densidad de carga superficial  $\sigma = \boldsymbol{P} \cdot \hat{n}$ , donde  $\hat{n}$  es un vector unitario radial. Estas cargas producen un campo eléctrico  $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = -(4\pi/3)\boldsymbol{P}$  donde empleamos el factor de despolarización  $-4\pi/3$ de una esfera. Este campo acelera las cargas de acuerdo a  $md^2\boldsymbol{\zeta}/d^2t = -e\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ . Escribiendo al campo en términos de  $\boldsymbol{\zeta}$ ,  $\boldsymbol{E} = -(4\pi n_0 e^2/3m)\boldsymbol{\zeta}$ , la ecuación de movimiento para  $\boldsymbol{\zeta}$  se convierte en,

$$\frac{d^2\boldsymbol{\zeta}}{d^2t} = -\frac{4\pi n_0 e^2}{3m}\boldsymbol{\zeta} \tag{6}$$


Figura 4: Esfera metálica cuyos electrones han sido desplazados en la dirección de  $\boldsymbol{\zeta}$  (flecha negra), dejando una ausencia de carga en la dirección opuesta induciendo polarización en el sistema  $\boldsymbol{P}$  (flechas verdes) y una carga superficial la cual produce un campo eléctrico  $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$  (flechas azules).

de la cual obtenemos la frecuencia  $\omega_d$  de las oscilaciones de carga en una esfera, a las que se les denominan como plasmón dipolar,

$$\omega_d^2 = \frac{4\pi n e^2}{3m} = \frac{\omega_p^2}{3}.$$
 (7)

Estos ejemplos muestran que en un metal los electrones pueden animarse de movimientos colectivos asociados a ciertas frecuencias de resonancia, las cuales a su vez dependen de la geometría, como ilustramos estudiando el caso de un sistema infinito, uno semiinfinito y una esfera. Más aún, si colocamos las partículas metálicas en el seno de una matriz dieléctrica habría un corrimiento adicional en su frecuencia de resonancia debido a las cargas inducidas en la superficie del dieléctrico. Si además hubiese un gran número de esferas, sus interacciones mutuas a través de los campos electromagnéticos inducidos podrían generar corrimientos adicionales de las resonancias.

Un ejemplo excepcional de las propiedades que emergen al generar *metamate*riales es la copa de Licurgo, una copa de cristal tallada en la época romana tardía, decorada con un friso que muestra escenas del mito del Rey Licurgo. La copa que data del siglo IV, D.C., se produjo a partir de una pieza en bruto de vidrio soplado de unos 15mm de espesor. Las figuras se cortaron, rectificaron y unieron a la pared del recipiente mediante pequeños puentes de vidrio. Aparte del trabajo artístico realizado en la decoración, la copa es de gran interés por las propiedades ópticas que muestra. El vidrio se ve de un color rojo-vino profundo cuando la luz lo atraviesa y de un color verde opaco cuando la luz que llega a nuestros ojos es reflejada por su superficie, como muestra la fig. 5. A este fenómeno se le denomina dicroísmo, y de los artefactos de vidrio romano encontrados, la copa es la que muestra dicho efecto más intensamente. [4] Estudios de la composición del vidrio muestran que tales propiedades son causadas por la presencia de finas partículas de oro, probablemente en una aleación con plata, dispersadas. Con estudios de microscopía de transmisión de electrones, TEM, por sus siglas en inglés, se pudieron determinar tamaños de las partículas de  $\approx 10nm$ . Se ha encontrado que contiene además partículas de diferentes metales y de materiales no metálicos. El color se debe al espectro de reflexión y de transmisión del medio compuesto formado por vidrio y por las partículas metálicas.



Figura 5: Copa de Licurgo, fabricada en la Roma tardía del siglo IV D.C., cuya fabricación resultante muestra propiedades ópticas excepcionales. Es una taza para beber de vidrio que se ve verde o roja, dependiendo de cómo es iluminada. ©The Trustees of the British Museum.

Aunque el oro es amarillo, las partículas de oro embebidas en una matriz de vidrio e interaccionando entre sí producen un color rojo.

## 1.2 Otras geometrías

Si consideráramos partículas con otras geometrías habría otras resonancias asociadas a la excitación de modos con varios patrones de distribución de carga. Por ejemplo, en la figura 6 mostramos resultados experimentales y los primeros resultados teóricos para los modos electromagnéticos esperados en pequeños cubos de sal [5], sus frecuencias de resonancia y su distribución asociada de carga superficial. En este caso se encontraron en lugar de un modo dipolar, como vimos para el caso de la esfera, seis modos principales y unos modos adicionales con poca fuerza de oscilador, con una polarización cuya distribución espacial muestra bastante riqueza.

## 1.3 Cristales fotónicos

Consideremos ahora un dieléctrico transparente no dispersivo homogéneo, como en la figura 7. La relación de dispersión de la luz en este medio está dada por  $k^2 = \epsilon \omega^2/c^2$  que corresponde a las dos rectas mostradas en la (fig. 7d). Si en vez de un dieléctrico homogéneo tuviéramos un cristal artificial formado por películas de dos materiales alternados (fig. 7b), el ímpetu y el vector de onda ya no serían cantidades conservadas. Las reflexiones múltiples en las interfaces producirían ondas esparcidas en que el vector de onda cambiaría  $k \to k + 2\pi n/d$  para enteros positivos y negativos n (fig. 7e), dando lugar a puntos de degeneración en que se cruzan las distintas réplicas de la relación de dispersión. El acoplamiento entre los campos esparcidos rompe la degeneración y abre *brechas fotónicas* evitando los cruces y dando origen a una relación



Figura 6: Modos resonantes de un cristal de sal y espectro de absorción teórico y experimental. Los signos del lado izquierdo indican la polarización en una de las ocho esquinas del cubo de sal correspondiente para cada uno de los seis modos principales. La posición y peso de cada resonancia se ilustran con las pequeñas gaussianas en la base del panel derecho, las cuales generan el espectro teórico al escalarse, ensancharse y sumarse.



Figura 7: (a)Medio dieléctrico homogéneo con respuesta  $\epsilon$ , (b) cristal fotónico unidimensional con funciones respuesta  $\epsilon_a$  y  $\epsilon_b$  y periodo d, y (c) cristal fotónico con periodicidad en más dimensiones. (d)Relación de dispersión  $\omega$  vs k de la luz del medio homogéneo. (e)Relaciones de dispersión trasladadas por  $0, \pm 2\pi/d$  en el espacio recíproco mostrando cruzamientos en el borde de la zona de Brillouin  $k = \pm \pi/d$ . (f)El acoplamiento abre una brecha en los puntos de degeneración evitando el cruce y formando brechas prohibidas.



Figura 8: Relación entre las direcciones del campo eléctrico E, densidad de flujo magnético B, vector de onda k, campo magnético H y vector de Poynting S en un metamaterial izquierdo isotrópico. Como (E, B, k) y (E, H, S) son triadas ordenadas derechas, y B y H son antiparalelos, entonces k y S son antiparalelos.

de dispersión (fig. 7f) organizada en *bandas fotónicas* análogas a las bandas electrónicas que describen la propagación de electrones en sólidos cristalinos. Algo similar sucedería si la periodicidad fuese bidimensional o tridimensional (fig. 7c) en cuyo caso podrían producirse brechas omnidireccionales en las que la luz no se propaga en ninguna dirección. Las brechas fotónicas explican algunos fenómenos naturales, como la iridiscencia en los caparazones de diversos insectos y los colores de las alas de las mariposas, colores producidos no por pigmentos que absorben la luz, sino por pequeñas estructuras dieléctricas transparentes que forman cristales fotónicos con regiones de frecuencia en que la luz es fuertemente reflejada por corresponder a brechas en que no se puede propagar. Estos colores se llaman por su origen *colores estructurales*. Introduciendo *defectos* en cristales fotónicos se pueden generar sitios en que la luz puede ser atrapada, hecho que ha encontrado aplicaciones tales como la elaboración de fibras ópticas fotónicas.

#### 1.4 Materiales izquierdos

Consideremos ahora un material cuya permitividad  $\epsilon(\omega)$  dependa de la frecuencia y tenga un comportamiento resonante. La relación de dispersión  $k^2 = \epsilon \omega^2/c^2$  implica que al pasar la resonancia, cuando  $\epsilon$  adquiere valores negativos, k se vuelve imaginario y la luz no puede propagarse. Esto explica la aparición del color en los materiales comunes, en que hay frecuencias características de cada material en que absorben luz y justo arriba hay frecuencias en que no se puede propagar. Si el material tuviera además una respuesta magnética  $\mu \neq 1$  la relación de dispersión cambiaría a  $k^2 = \epsilon \mu \omega^2 / c^2$ . Si tanto  $\epsilon$  como  $\mu$  tuvieran resonancias cercanas, arriba de éstas podría suceder que ambas fueran negativas,  $\epsilon < 0$  y  $\mu < 0$ . En este caso, su producto  $\epsilon \mu > 0$  sería positivo y sí podría haber propagación con un vector de onda real. Sin embargo, esta propagación sería curiosa. A partir de las ecuaciones de Maxwell, por ejemplo, de las leyes de Faraday y de Gauss magnética, sabemos que para una onda plana, el campo eléctrico E, la densidad de flujo magnético B y el vector de onda k forman una triada ordenada derecha, como ilustra la figura 8. Sin embargo, la definición del vector de Poynting y la ley de Ampère-Maxwell implican que el campo eléctrico E, el campo magnético H y el flujo de energía S también forman



Figura 9: Una onda incide desde un medio normal (verde) sobre la interfaz que lo separa de un medio con permitividad y permeabilidad negativas (rojo). Se muestran esquemáticamente las direcciones de los vectores de onda (flechas azules) y de los vectores de Poynting (flechas amarillas) de las ondas incidente, reflejada y transmitida. La proyección sobre la interfaz de los tres vectores de onda debe coincidir. El flujo de energía de la onda transmitida debe alejarse de la interfaz. Por ello, la componente normal del vector de onda transmitido apunta hacia la interfaz.

una triada ordenada derecha. Sin embargo, si  $\mu < 0$ , entonces **B** y **H** apuntan en direcciones opuestas. Luego, S japunta en la dirección opuesta a k! La dirección en que avanza la fase de la onda es opuesta a la dirección en que avanza la energía. Esto sólo puede ser posible si la velocidad de grupo es opuesta a la velocidad de fase. Una consecuencia curiosa de este resultado se manifiesta cuando una onda se refracta en una superficie plana. La ley de conservación del ímpetu asociada a una simetría translacional implica que las proyecciones del vector de onda  $k_{\parallel}$  a lo largo de la superficie deben coincidir para las ondas reflejada, transmitida e incidente. De aquí se derivan las leyes de la reflexión y de Snell. Sin embargo, la causalidad requiere que las ondas esparcidas por la superficie, la onda incidente y la onda reflejada, deben tener un flujo de energía que se aleja de la superficie. Ello implica que cuando incide luz desde un medio ordinario hacia un medio con  $\epsilon < 0$  y  $\mu < 0$ , la componente normal del vector de onda de la onda transmitida ¡debe apuntar hacia la superficie!, como ilustra la fig. 9. De esta figura podemos inferir que una onda que incide viajando hacia arriba se refracta hacia abajo y viceversa. Eso lleva a plantear dispositivos como el ilustrado en la fig. 10, consistente en una película plana de un metamaterial izquierdo con  $\epsilon < 0$  y  $\mu < 0$ . La luz que emerge de una fuente puntual y viaja hacia la derecha y hacia arriba se refracta hacia abajo mientras que luz que viaja hacia abajo se refracta hacia arriba. Algo análogo sucede al emerger de la película. Es posible entonces que todos los rayos que parten de la fuente luminosa converjan en un punto, la imagen de la fuente formada por una lente plana.

Desafortunadamente, no existen materiales naturales en los que tanto la permitividad como la permeabilidad sean negativas a la misma frecuencia. Sin embargo, hay metamateriales artificiales que pueden describirse por una permitividad y permeabilidad efectiva que sí cumplan esta condición. La figura 11 muestra un ejemplo formado por un arreglo de parejas de anillos interrumpidos que funcionan como un circuito LC resonante. La corriente recorriendo los anillos produce un dipolo mag-



Figura 10: Lente consistente en una película plana de un metamaterial izquierdo (rojo) en el seno de un material ordinario (verde). Se ilustra la trayectoria de varios rayos que emergen de una fuente puntual de luz y convergen en un punto imagen.



Figura 11: Metamaterial izquierdo formado por una red de parejas de anillos conductores interrumpidos (*split rings*) y pistas conductoras rectas sobre un dieléctrico. (Tomada de la ref. [6])

nético, y debido a su interrupción, produce una acumulación de cargas que lo acopla con el otro anillo. Este circuito tiene una resonancia arriba de la cual la permeabilidad macroscópica es negativa. Por otro lado, una serie de pistas rectas permiten que el material se comporte en la dirección vertical como un conductor, por lo cual la permitividad es negativa abajo de la frecuencia de plasma efectiva.

#### 1.5 Partículas dieléctricas

Hemos visto arriba que partículas metálicas pequeñas pueden tener resonancias plasmónicas cuyas frecuencias dependen en general de su composición y de su geometría. También partículas dieléctricas pueden tener resonancias aunque estén formadas por materiales no dispersivos, siempre y cuando la longitud de onda de la luz en su interior sea conmensurable con su tamaño. Estas resonancias se deben a la interferencia constructiva entre ondas múltiplemente reflejadas por sus superficies. Por ejemplo, partículas esféricas o cilíndricas muestran resonancias de Mie cuando el perímetro de su sección transversal es cercano a un múltiplo de la longitud de onda. Una ventaja de estas resonancias sobre las resonancias plasmónicas para diseñar y construir dispositivos fotónicos es que las pérdidas de energía debidas a la absorción dentro del material son menores que las pérdidas óhmicas que suelen mostrar los metales. Sin embargo, estas resonancias requieren que las partículas tengan un tamaño relativamente grande conmensurable con la longitud de onda en su interior. Sin embargo, si se emplean materiales con un índice de refracción alto, la longitud de onda dentro de estos materiales puede ser mucho menor que la correspondiente al espacio vacío, permitiendo así resonancias dieléctricas en partículas de tamaño muy pequeñas, en analogía a las resonancias plasmónicas.

#### 1.6 Metasuperficies

Las funciones respuesta de una partícula cambian de signo conforme la frecuencia de la luz pasa de ser menor a ser mayor a su frecuencia de resonancia. Por tanto, la fase que adquiere un haz luminoso al pasar a través de una superficie cubierta por partículas depende muy sensiblemente de la cercanía de la frecuencia a la frecuencia de resonancia de las partículas, la cual a su vez, depende de la geometría. Por tanto, modulando la geometría de las partículas a lo largo de la superficie, puede modularse la fase que adquiere la luz en forma análoga a como el ancho variable de una lente o de un prisma modula la fase de los rayos de luz que los atraviesan.

La ley de Snell usual implica que a lo largo de una interfaz uniforme hay un empatamiento de fases  $\phi^{\alpha}(\mathbf{r}_{\parallel}) = \mathbf{k}_{\parallel}^{\alpha} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}$  entre la onda incidente, la onda reflejada y la onda transmitida, por lo cual los vectores de onda  $\mathbf{k}_{\parallel}^{\alpha}$  proyectados sobre la superficie son iguales para las tres ondas  $\alpha = i, r, t$ . Sin embargo, si la superficie no es uniforme y a lo largo de ésta la onda transmitida y/o reflejada adquiere una fase adicional  $\psi^{\alpha}(\mathbf{r}_{\parallel})$  a la de la onda incidente,  $\phi^{\alpha}(\mathbf{r}_{\parallel}) = \mathbf{k}_{\parallel}^{i} \cdot \mathbf{r}_{\parallel} + \psi^{\alpha}(\mathbf{r}_{\parallel}) \approx (\mathbf{k}_{\parallel}^{i} + \nabla_{\parallel}\psi^{\alpha}(0)) \cdot \mathbf{r}_{\parallel}$  la ley de Snell debe generalizarse,

$$\boldsymbol{k}_{\parallel}^{\alpha} = \boldsymbol{k}_{\parallel}^{i} + \nabla_{\parallel}\psi^{\alpha}, \quad (\alpha = r, t)$$
(8)

i.e., el ímpetu paralelo a la interfaz adquiere una contribución debida a la variación de la fase adicional  $\psi^{\alpha}$ . Por lo tanto, modulando la fase de una onda a lo largo de una



Figura 12: Metasuperficie formada por un arreglo de partículas en forma de L con ángulos variables (izquierda), capaz de separar un haz luminoso en sus componentes con distintas polarizaciones (derecha).(Tomada de la ref. [7]).

superficie podemos manipular la dirección de la luz transmitida o reflejada. Para esto se pueden colocar partículas con un índice de refracción grande sobre una superficie ordinaria y modificar a lo largo de esta su geometría, orientación o densidad, dando lugar a una *metasuperficie*.

Como las resonancias dependen también de la polarización de la luz, este efecto puede usarse para desviar haces de luz de acuerdo a su polarización. En la fig. 12 mostramos una *metasuperficie* formada por partículas en forma de L cuya respuesta difiere cuando es iluminada con polarización horizontal o vertical, y que por lo tanto puede separar un haz de luz no polarizada en dos haces con polarizaciones perpendiculares. Otros sistemas pueden separar la luz de acuerdo a su helicidad, en haces con polarización circular derecha o circular izquierda. Mediante otros arreglos se puede variar la fase a lo largo de la dirección radial, de forma de hacer converger rayos que arriben en la dirección normal sobre un punto, su foco, creando así una metalente, como la que ilustra la figura 13.

# 2 Teoría

Las propiedades ópticas de materiales compuestos como los presentados arriba, metamateriales, cristales fotónicos, materiales izquierdos, etc., con propiedades en ocasiones exóticas, están determinadas no sólo por su composición, sino también por su geometría. Propiedades como las relaciones de dispersión de los modos electromagnéticos que se propagan a través de un metamaterial extendido, las amplitudes de reflexión y transmisión, y relaciones de dispersión de modos electromagnéticos confinados a la superficie de sistemas con fronteras, las secciones transversales de dispersión, absorción y extinción de partículas formadas por partículas, pueden ser expresadas en términos del operador dieléctrico macroscópico del compuesto a través



Figura 13: Metalente formada por un arreglo de prismas de alto índice de refracción con orientaciones variables (izquierda). Refracción de la luz debido a la modulación de fase al atravesar el metalente (centro). Imagen de una fuente puntual formada por la metalente y por una lente convencional (derecha). (Tomada de la ref. [8])

de las soluciones de las ecuaciones de Maxwell en dicho material. En esta sección presentaremos un formalismo para obtener la respuesta macroscópica en términos de la respuesta microscópica.

### 2.1 Proyectores promedio y fluctuación

Primero notamos que el campo electromagnético dentro de un material inhomogéneo tiene oscilaciones relacionadas con su *textura* y la escala de variación espacial de estas oscilaciones es del orden del tamaño de las partículas que forman el compuesto así como de las distancias entre partículas vecinas. Llamamos campo macroscópico a aquel del cual hemos eliminado dichas fluctuaciones. El campo macroscópico puede tener oscilaciones espaciales, pero éstas están asociadas a las oscilaciones temporales del campo y a la longitud de onda finita de los campos que se propagan. En todo caso, es conveniente introducir dos operadores, el promedio  $\hat{\mathcal{P}}_p$  y la fluctuación  $\hat{\mathcal{P}}_f$ , tales que al actuar sobre un campo arbitrario F producen el campo promedio  $F_p = \hat{\mathcal{P}}_p F$ y el campo fluctuante  $F_f = \hat{\mathcal{P}}_f F$ . Existen muchas formas de definir promedio. En sistemas desordenados podríamos usar el promedio de ensamble, es decir, sumar sobre N realizaciones del sistema y dividir entre N, tomando el límite  $N \to \infty$ . En sistemas dinámicos como un fluido, y para campos que oscilen lentamente con respecto a los tiempos característicos en que cambia el sistema, podríamos emplear un promedio temporal. Para otro tipo de sistemas podríamos tomar un promedio espacial o aplicar un filtro pasabajo en el espacio recíproco. Lo que debe ser claro es que un campo se promedia cuando se le remueven las fluctuaciones, i.e.,  $\mathcal{P}_p = \hat{1} - \mathcal{P}_f$ , con  $\hat{\mathbf{1}}$  el operador identidad. Si pretendiéramos remover las fluctuaciones de un campo que ya hemos promediado, encontraríamos que no queda nada por remover. Esto implica que el operador promedio es idempotente  $\hat{\mathcal{P}}_p^2 = \hat{\mathcal{P}}_p$ , i.e., el promedio del promedio es el promedio. Análogamente, las fluctuaciones son lo que queda al remover el promedio. Por lo tanto, el operador fluctuación también es idempotente,  $\hat{\mathcal{P}}_f^2 = \hat{\mathcal{P}}_f$ . Finalmente, si eliminamos las fluctuaciones y el promedio, no nos queda nada,  $\hat{\mathcal{P}}_p \hat{\mathcal{P}}_f = 0$ ,  $\hat{\mathcal{P}}_f \hat{\mathcal{P}}_p = 0$ .

Los resultados previos muestran que  $\hat{\mathcal{P}}_p$  y  $\hat{\mathcal{P}}_f$  son proyectores que mandan a un campo al subespacio de los campos promedio y al subespacio de los campos fluctuantes respectivamente, y que el espacio donde vive originalmente el campo vectorial es una suma directa de estos dos subespacios. Esto permite escribir formalmente a un campo arbitrario como si fuera un vector de dos componentes,

$$\boldsymbol{F} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{F}_p \\ \boldsymbol{F}_f \end{pmatrix},\tag{9}$$

aunque cada componente en sí no es un número sino un campo vectorial. Análogamente, las funciones respuesta pueden representarse como operadores lineales en términos de matrices de dos por dos. Así, la ecuación  $D = \hat{\epsilon} E$  puede escribirse como una ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{D}_p \\ \boldsymbol{D}_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_{pp} & \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_{pf} \\ \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_{fp} & \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_{ff} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{E}_p \\ \boldsymbol{E}_f \end{pmatrix}.$$
 (10)

Aquí, hemos definido  $\hat{O}_{\alpha\beta} = \hat{\mathcal{P}}_{\alpha}\hat{O}\hat{\mathcal{P}}_{\beta}$  ( $\alpha, \beta = p, f$ ) para cualquier operador  $\hat{O}$ . Interpretaremos a la ec. (10) como un ecuación material *microscópica*, pues incorpora las fluctuaciones espaciales derivadas de la textura del material. La correspondiente ecuación macroscópica sería

$$\boldsymbol{D}_M = \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_M \boldsymbol{E}_M,\tag{11}$$

donde identificamos a los campos macroscópicos como los campos promediados y por lo tanto, libres de fluctuaciones,  $D_M \equiv D_p$ ,  $E_M \equiv E_p$ . En general,  $\hat{\epsilon}_M$  no es el promedio  $\hat{\epsilon}_{pp}$  de  $\hat{\epsilon}$ , pues puede haber *correlaciones* entre las fluctuaciones espaciales de  $\epsilon(\mathbf{r})$  y del campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ .

#### 2.2 Proyectores longitudinal y transversal

Por otro lado, recordemos que de acuerdo al teorema de Helmholtz, todo campo vectorial  $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^L + \boldsymbol{F}^T$  puede escribirse como la suma de dos contribuciones, un campo longitudinal  $\boldsymbol{F}^L = \hat{\mathcal{P}}^L \boldsymbol{F}$  y un campo transversal  $\boldsymbol{F}^T = \hat{\mathcal{P}}^T \boldsymbol{F}$ , que cumplen las ecuaciones

$$\nabla \times \boldsymbol{F}^{L} = 0, \tag{12a}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{F}^{L} = \nabla \cdot \boldsymbol{F}, \tag{12b}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{F}^T = \nabla \times \boldsymbol{F},\tag{12c}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{F}^T = 0. \tag{12d}$$

Para obtener los proyectores  $\hat{\mathcal{P}}^L$  y  $\hat{\mathcal{P}}^T$  podemos empezar con la ec. (12a), la cual implica que  $\mathbf{F}^L$  puede derivarse de algún potencial escalar  $\Phi$  como  $\mathbf{F}^L = -\nabla \Phi$ . Luego, la ecuación (12b) implica que el potencial obedece la ec. de Poisson,  $\nabla^2 \Phi =$   $-\nabla \cdot \mathbf{F}$ , cuya solución formal es  $\Phi = -\hat{\nabla}^{-2}\hat{\nabla} \cdot \mathbf{F}$ . Aquí,  $\hat{\nabla}^{-2}$  representa el operador inverso al laplaciano, el cual puede escribirse en el espacio real como un operador integral cuyo kernel en 3D es el potencial coulombiano  $-1/(4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ . Finalmente, obtenemos  $\mathbf{F}^L = \hat{\nabla}\hat{\nabla}^{-2}\hat{\nabla} \cdot \mathbf{F}$  de donde identificamos al proyector longitudinal

$$\hat{\mathcal{P}}^L = \hat{\nabla}\hat{\nabla}^{-2}\hat{\nabla}\cdot.$$
(13)

Análogamente, podemos identificar al proyector transversal

$$\hat{\mathcal{P}}^T = \hat{\mathbf{1}} - \hat{\mathcal{P}}^L = -\hat{\nabla} \times \hat{\nabla}^{-2} \hat{\nabla} \times .$$
(14)

#### 2.3 Caso no retardado

Para obtener la respuesta macroscópica  $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_M$ , que como hemos mencionado no es el simple promedio de la respuesta microscópica  $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ , recurrimos a las ecuaciones de Maxwell. Consideremos un material formado por inclusiones muy pequeñas y muy cercanas entre sí, cuyo tamaño y separación sean mucho menores que la longitud de onda característica de la luz  $\lambda_0 = 2\pi c/\omega$  a una frecuencia  $\omega$  dada. En este caso podemos ignorar el *retardamiento*, tomar el límite  $c \to \infty$  en la ecuación de Faraday y tratar al campo eléctrico como si fuera un campo puramente *longitudinal*,  $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}^L$ , derivable de un potencial escalar. Por tanto, la proyección longitudinal del desplazamiento,  $\boldsymbol{D}^L = \hat{\mathcal{P}}^L \hat{\boldsymbol{\epsilon}} \boldsymbol{E} = \hat{\mathcal{P}}^L \hat{\boldsymbol{\epsilon}} \hat{\mathcal{P}}^L \boldsymbol{E}^L$ ,

$$\boldsymbol{D}^{L} = \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{LL} \boldsymbol{E}^{L}, \tag{15}$$

cumple las mismas ecuaciones que el campo eléctrico longitudinal externo,

$$\nabla \times \boldsymbol{D}^{L} = 0 = \nabla \times \boldsymbol{E}_{ex}^{L},$$
  

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D}^{L} = 4\pi\rho^{ex} = \nabla \cdot \boldsymbol{E}_{ex}^{L}.$$
(16)

Aquí, hemos definido  $\hat{O}^{\alpha\beta} = \hat{\mathcal{P}}^{\alpha}\hat{O}\hat{\mathcal{P}}^{\beta}$  ( $\alpha, \beta = L, T$ ) para cualquier operador  $\hat{O}$ . Entonces, podemos identificar a  $D^L$  con el campo eléctrico longitudinal externo. Siendo un campo externo, sus fuentes son únicamente las cargas externas  $\rho^{\text{ex}}$ , las cuales no tienen absolutamente nada que ver con la composición del material ni con la disposición de sus componentes. En particular,  $D^L$  no tiene fluctuaciones espaciales derivadas de la textura del material,  $D^L = D_p^L = \hat{\mathcal{P}}_p D^L$ . Despejando el campo eléctrico de la ec. (15) obtenemos

$$\boldsymbol{E}^{L} = (\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{LL})^{-1} \boldsymbol{D}^{L}, \tag{17}$$

y promediando ambos lados de la ecuación, usando el hecho de que  $D^L$  no tiene fluctuaciones y que  $\hat{\mathcal{P}}_p$  es idempotente, obtenemos

$$\boldsymbol{E}_{p}^{L} = (\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{LL})_{pp}^{-1} \boldsymbol{D}_{p}^{L}.$$
(18)

Finalmente, identificando los campos promedios con los campos macroscópicos y su relación con la respuesta macroscópica, podemos identificar[9]

$$(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_M^{LL})^{-1} = (\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^{LL})_{pp}^{-1}.$$
(19)

Podemos leer este resultado de la siguiente manera: el inverso de la proyección longitudinal de la respuesta dieléctrica macroscópica es igual al promedio del inverso de la proyección longitudinal de la respuesta microscópica.[10]

#### 2.4 Caso retardado

Como hemos mostrado, para obtener la respuesta macroscópica de un sistema no basta con promediar cualquier función respuesta. Por ejemplo, el promedio de  $\epsilon$  no tiene significado como respuesta macroscópica. Sin embargo, si logramos encontrar un operador que responda a una excitación *externa*, la cual no tiene fluctuaciones espaciales asociadas a la textura microscópica del material, su promedio nos proporciona la respuesta correspondiente macroscópica. Para dar un ejemplo de éste proceso, a continuación obtendremos la respuesta macroscópica en el caso en que no podemos ignorar el retardamiento. Tomando el rotacional de la ley de Faraday y sustituyendo la ec. de Ampère-Maxwell podemos obtener una ecuación de onda con fuentes, que podemos escribir como

$$\hat{\mathcal{W}}\boldsymbol{E} = \frac{4\pi}{i\omega}\boldsymbol{j}^{\mathrm{ex}},\tag{20}$$

donde

$$\hat{\mathcal{W}} = \hat{\boldsymbol{\epsilon}} + \frac{c^2}{\omega^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}^T \tag{21}$$

es una generalización del *operador de onda*. Podemos resolver la ec. (20) formalmente para obtener el campo en el material

$$\boldsymbol{E} = \frac{4\pi}{i\omega} \hat{\boldsymbol{\mathcal{W}}}^{-1} \boldsymbol{j}^{\text{ex}},\tag{22}$$

e interpretar al inverso del operador de onda  $\hat{\mathcal{W}}^{-1}$  como una respuesta a la excitación externa  $\boldsymbol{j}^{\text{ex}}$ , y a su promedio como la respuesta macroscópica a la corriente externa,

$$\hat{\mathcal{W}}_M^{-1} = \hat{\mathcal{W}}_{pp}^{-1}.$$
(23)

Interpretando al operador de onda macroscópico en términos de la permitividad macroscópica

$$\hat{\mathcal{W}}_M = \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_M + \frac{c^2}{\omega^2} \nabla^2 \hat{\mathcal{P}}^T \tag{24}$$

podemos despejarla tras invertir la ecuación (23). Formalmente, podemos obtener la permitividad macroscópica a partir de la permitividad microscópica siguiendo los pasos indicados en la figura 14. A partir de la respuesta dieléctrica de las componentes de nuestro material podemos construir el operador de onda, lo invertimos, lo promediamos, lo identificamos en términos del operador de onda macroscópico, lo volvemos a invertir y finalmente obtenemos la respuesta dieléctrica macroscópica.[11]

#### 2.5 Sistema binario periódico sin retardamiento

Consideremos ahora un sistema periódico hecho de dos materiales, digamos, de partículas de un material B embebidas en una matriz de un material A. La respuesta dieléctrica *microscópica* es en este caso

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \begin{cases} \epsilon_A & \text{si } \mathbf{r} \in A\\ \epsilon_B & \text{si } \mathbf{r} \in B \end{cases}$$
(25)



Figura 14: Pasos para obtener la respuesta macroscópica  $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_M$  a partir de la respuesta microscópica  $\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{r})$  incluyendo efectos de retardamiento. Primero construimos el operador de onda, lo invertimos, lo promediamos, identificamos el operador de onda macroscópico inverso, lo invertimos y finalmente identificamos el operador dieléctrico macroscópico.

la cual puede escribirse como

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_A}{u} (u - B(\mathbf{r})), \qquad (26)$$

donde

$$u \equiv \frac{1}{1 - \epsilon_B / \epsilon_A} \tag{27}$$

se conoce como la variable espectral, y

$$B(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \text{si } \mathbf{r} \in A\\ 1, & \text{si } \mathbf{r} \in B \end{cases}$$
(28)

es la función característica. Notemos que u depende de la composición del material y puede depender de la frecuencia a través de las funciones dieléctricas de las componentes, mientras que  $B(\mathbf{r})$  no depende de la composición ni de la frecuencia, sino únicamente de la geometría.

Supongamos que nuestro sistema es periódico, caracterizado por una *red de Bra*vais  $\{\mathbf{R}\}$ , tal que  $\epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \epsilon(\mathbf{r})$ . A esta red le corresponde una *red recíproca*  $\{\mathbf{K}\}$ , formada por todos aquellos vectores de onda tales que el producto escalar  $\mathbf{K} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n$ , con n un número entero para cualquier vector real  $\mathbf{R}$  y vector recíproco  $\mathbf{K}$ .

Entonces, podemos describir a  $\hat{\epsilon}$  como una matriz en el espacio recíproco mediante una integral de Fourier,

$$\epsilon_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'} = \epsilon_{\boldsymbol{K}-\boldsymbol{K}'} = \frac{1}{\Omega} \int_0 d^3 r \,\epsilon(\boldsymbol{r}) e^{-i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}}.$$
(29)

donde la integral se realiza sobre una cel<br/>da primitiva cualquiera, cuyo volumen es $\Omega.$ La relación conversa es

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} \epsilon_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}.$$
(30)

El teorema de Bloch nos permite escribir a los campos en el interior de un sistema periódico como una superposición de ondas de Bloch, cada una de las cuales cambia por una fase  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$  cuando nos desplazamos un vector de la red, donde  $\mathbf{k}$  es el vector de Bloch, una especie de vector de onda, que es una cantidad conservada. Por tanto, eligiendo un valor cualquiera de  $\mathbf{k}$  podemos escribir cualquier campo en términos de una suma de Fourier como

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{K}} \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{K}} e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K})\cdot\boldsymbol{r}}.$$
(31)

El teorema de convolución nos permite entonces escribir la ecuación material  $D(r) = \epsilon(r)E(r)$  en el espacio recíproco como la ecuación matricial

$$\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{K}} = \sum_{\boldsymbol{K}'} \epsilon_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'} \boldsymbol{E}_{\boldsymbol{K}'}.$$
(32)

Como la respuesta del material puede representarse en distintos espacios, como son el espacio real o el espacio recíproco, conviene abstraer la acción de la respuesta dieléctrica y tratarla como un operador  $\hat{\epsilon}$  abstracto, más que como una función de la posición.

En el espacio recíproco, el operador  $\nabla$  se puede representar por un producto con el vector  $\nabla \rightarrow i(\mathbf{k} + \mathbf{K})$ , por lo cual el laplaciano es  $\nabla^2 \rightarrow -|\mathbf{k} + \mathbf{K}|^2$  y su inverso es simplemente  $\nabla^{-2} \rightarrow -1/|\mathbf{k} + \mathbf{K}|^2$ . Por lo tanto, el proyector longitudinal (13) se puede representar por la matriz

$$\mathcal{P}_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'}^{L} = \delta_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'}\hat{\boldsymbol{K}}\hat{\boldsymbol{K}},\tag{33}$$

donde definimos los vectores unitarios

$$\hat{\boldsymbol{K}} \equiv \frac{\boldsymbol{k} + \boldsymbol{K}}{|\boldsymbol{k} + \boldsymbol{K}|},\tag{34}$$

y  $\delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}$  es una función delta de Kronecker.

Los vectores recíprocos  $\mathbf{K} \neq 0$  corresponden a oscilaciones con longitudes de onda del orden de el parámetro de red del sistema periódico. Es conveniente entonces *definir* el promedio como un filtro pasabajos en el espacio recíproco que elimina todos los vectores recíprocos, exceptuando  $\mathbf{K} = 0$ , convirtiendo una onda de Bloch en una onda plana con vector de onda  $\mathbf{k}$ . Escribimos entonces

$$\mathcal{P}_{p,\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'} = \delta_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{0}}\delta_{\boldsymbol{K}'\boldsymbol{0}}.\tag{35}$$

De acuerdo a la ec. (19), podemos hallar la respuesta macroscópica siguiendo los siguientes pasos:

- 1. Expresamos la permitividad como una matriz  $\epsilon_{KK'}$  en el espacio recíproco haciendo una transformación de Fourier (ec. (29)).
- 2. Tomamos su proyección longitudinal,  $\epsilon_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{k}'}^{LL}$  multiplicando a izquierda y derecha por el proyector longitudinal (ec. (33)).
- 3. Invertimos la matriz resultante en el subespacio de campos vectoriales longitudinales  $(\epsilon_{KK'}^{LL})^{-1}$ .
- 4. Promediamos la inversa tomando el elemento  $\mathbf{K} = \mathbf{K}' = 0$ .
- 5. Interpretamos el resultado como el inverso de la proyección longitudinal del tensor dieléctrico macroscópico.

El procedimiento anterior puede resumirse como  $\boldsymbol{\epsilon}_M^{LL} = \hat{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{\epsilon}_M^{LL} \hat{\boldsymbol{k}}$ , donde la *componente* longitudinal de la respuesta es

$$\epsilon_M^{LL} = \hat{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_M \cdot \hat{\boldsymbol{k}} = \left( \left( \hat{\boldsymbol{K}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'} \hat{\boldsymbol{K}}' \right)^{-1} \Big|_{\boldsymbol{K} = \boldsymbol{K}' = \boldsymbol{0}} \right)^{-1}.$$
(36)

Repitiendo el cálculo indicado por la ec. (36) para distintas direcciones k del vector de onda, podemos hallar todas las componentes del tensor dieléctrico macroscópico  $\epsilon_M$ .

#### 2.6 Recursión de Haydock

De acuerdo a la sección anterior, para obtener la respuesta macroscópica de un medio binario arbitrario en el límite de longitud de onda larga, basta invertir la matriz  $\hat{K} \cdot \epsilon_{KK'} \hat{K}'$  y tomar el elemento **00** del resultado. Sustituyendo la ec. (26), obtenemos

$$\frac{1}{\epsilon_M^{LL}} = \frac{u}{\epsilon_A} \left( u \delta_{\mathbf{K}\mathbf{K}'} - B_{\mathbf{K}\mathbf{K}'}^{LL} \right)^{-1} \Big|_{\mathbf{K} = \mathbf{K}' = 0}, \qquad (37)$$

donde introdujimos la componente longitudinal de la función característica en el espacio recíproco

$$B_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'}^{LL} = \hat{\boldsymbol{K}} \cdot B_{\boldsymbol{K}-\boldsymbol{K}'} \hat{\boldsymbol{K}}', \qquad (38)$$

y  $B_{\mathbf{K}-\mathbf{K}'}$  es el coeficiente de Fourier de la función característica  $B(\mathbf{r})$  correspondiente al vector recíproco  $\mathbf{K} - \mathbf{K}'$ .

Notamos que en la ec. (37) debemos calcular el inverso de un operador  $(u - \hat{B}^{LL})$ representado como una matriz en el espacio recíproco, donde u es un número complejo y  $\hat{B}^{LL}$  es un operador hermitiano, y luego proyectar el resultado sobre un estado  $|0\rangle$  correspondiente a una onda plana con vector de onda k. Esto es análogo al cálculo del operador de Green proyectado  $\langle 0|\hat{\mathcal{G}}(\varepsilon)|0\rangle$  en mecánica cuántica, donde  $\hat{\mathcal{G}}(\varepsilon) = (\varepsilon - \hat{\mathcal{H}})^{-1}$  es el operador de Green correspondiente a un operador hamiltoniano  $\mathcal{H}$  evaluado para un valor  $\varepsilon$  de una energía compleja. Entre las aplicaciones del operador de Green proyectado se encuentra el cálculo de la densidad de estados cuánticos proyectada. Podemos entonces tomar prestado el método recursivo de Haydock [12] para calcular proyecciones de funciones de Green. De acuerdo a nuestra analogía, u juega el papel de energía compleja  $\varepsilon$  y  $\hat{B}^{LL}$  juega el papel de hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}$ .

Hemos definido el estado  $|0\rangle$  como el correspondiente a una onda plana con vector de onda  $\mathbf{k}$ , i.e., un estado cuya representación en el espacio recíproco es  $\langle \mathbf{K}|0\rangle = \delta_{\mathbf{K}0}$ , pues no tiene contribuciones de ondas con  $\mathbf{K} \neq 0$ . Ahora, podemos generar un nuevo estado haciendo actuar a nuestro hamiltoniano sobre el estado inicial,  $|\tilde{1}\rangle = \hat{\mathcal{H}}|0\rangle$ . Escribimos este estado como una combinación lineal del estado que ya teníamos  $|0\rangle$  y un estado nuevo  $|1\rangle$  del cual pedimos que sea ortogonal a  $|0\rangle$ y que esté normalizado,  $|\tilde{1}\rangle = b_1 |1\rangle + a_0 |0\rangle$ . Ahora repetimos el procedimiento con el estado  $|1\rangle$ , i.e.,  $|\tilde{2}\rangle = \hat{\mathcal{H}} |1\rangle = b_2 |2\rangle + a_1 |1\rangle + b_1 |0\rangle$ . El caso genérico sería

$$\left|\tilde{n}\right\rangle = \mathcal{H}\left|n-1\right\rangle = b_{n}\left|n\right\rangle + a_{n-1}\left|n-1\right\rangle + b_{n-1}\left|n-2\right\rangle,\tag{39}$$

donde exigimos que todos los estados sean ortonormales, es decir,

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}.\tag{40}$$

Aquí empleamos el producto escalar

$$\langle n|m\rangle = \sum_{\boldsymbol{K}} \phi_n^*(\boldsymbol{K})\phi_m(\boldsymbol{K}) = \frac{1}{\Omega} \int_0 d^3r \,\phi_n^*(\boldsymbol{r})\phi_m(\boldsymbol{r}) \tag{41}$$

donde, copiando el lenguaje de la mecánica cuántica,  $\phi_m(\mathbf{K}) = \langle \mathbf{K} | n \rangle$  es la función de onda correspondiente al estado  $|n\rangle$  evaluada en el vector recíproco  $\mathbf{K}$ , y  $\phi_m(\mathbf{r}) =$ 

 $\langle \boldsymbol{r}|n\rangle$  es la función de onda correspondiente al mismo estado pero evaluada en la posición  $\boldsymbol{r}$ , y donde hemos empleado la identidad de Parseval.

Notamos que en la ec. (39) no aparecen los términos  $|n-3\rangle$ ,  $|n-4\rangle$ , etc. pues nuestro operador es hermitiano. Por ejemplo, i.e.,  $\langle n-3|\tilde{n}\rangle = \langle n-3|H|n-1\rangle =$  $\langle n-1|H|n-3\rangle^* = (\langle n-1|(b_{n-2}|n-2\rangle + a_{n-3}|n-3\rangle + b_{n-3}|n-4\rangle))^* = 0$ . Los coeficientes de Haydock son reales y pueden obtenerse de la condición de ortonormalidad,

$$a_{n-1} = \langle n-1|\hat{\mathcal{H}}|n-1\rangle \tag{42}$$

у

$$|n\rangle = (|\tilde{n}\rangle - a_{n-1} |n-1\rangle - b_{n-1} |n-1\rangle)/b_n, \quad \langle n|n\rangle = 1.$$
 (43)

De esta manera podemos construir una base  $\{|n\rangle\}$  en la cual el hamiltoniano  $\mathcal{H}$  puede representarse por una matriz tridiagonal

$$\mathcal{H}_{nn'} = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & 0 \dots \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & 0 \dots \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & 0 \dots \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & b_4 \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$
(44)

De acuerdo a la ec. (37), la respuesta macroscópica está dada por la proyección de la inversa  $\mathcal{G}_{nn'}$  de la matriz tridiagonal  $\varepsilon - \mathcal{H}_{nn'}$  sobre el estado  $|0\rangle$ , i.e., no necesitamos toda la inversa, sino sólo su elemento  $\mathcal{G}_{00}$ . Notamos que el vector columna  $\mathcal{G}_{n0}$  obedece la ecuación

$$\sum_{m} (\varepsilon \delta_{nm} - \mathcal{H}_{nm}) \mathcal{G}_{m0} = \delta_{n0}.$$
(45)

Si truncamos la ecuación después de N renglones, el último renglón de esta ecuación sería de la forma

$$-b_N \mathcal{G}_{N-1,0} + (u - a_N) \mathcal{G}_{N,0} = 0, \qquad (46)$$

lo cual nos permite despejar

$$\mathcal{G}_{N,0} = \frac{b_N}{u - a_N} \mathcal{G}_{N-1,0}.$$
(47)

Sustituyendo esta solución en la penúltima ecuación

$$b_{N-1N-2,0} + (u - a_{N-1})\mathcal{G}_{N-1,0} - b_N \mathcal{G}_{N,0} = -b_{N-1}\mathcal{G}_{N-2,0} + \left(u - a_{N-1} - \frac{b_N^2}{u - a_N}\right)\mathcal{G}_{N-1} = 0,$$
(48)

podemos despejar

$$\mathcal{G}_{N-1,0} = \frac{b_{N-1}}{u - a_{N-1} - \frac{b_N^2}{u - a_N}} \mathcal{G}_{N-2,0}.$$
(49)

Prosiguiendo de esta forma con todas las ecuaciones correspondientes a n > 0,

 $-b_n \mathcal{G}_{n-1,0} + (u - a_n) \mathcal{G}_{n,0} - b_{n+1} \mathcal{G}_{n+1,0} = 0,$ (50)

llegamos a

$$\mathcal{G}_{1,0} = \frac{b_1}{u - a_1 - \frac{b_2^2}{u - a_2 - \frac{b_3^2}{u - a_3 - \ddots}}} \mathcal{G}_{0,0}.$$
(51)

Sustituyendo en la ecuación correspondiente a n = 0,

$$(u - a_0)\mathcal{G}_{00} - b_{n+1}\mathcal{G}_{1,0} = 1, \tag{52}$$

obtenemos una expresión para  $\mathcal{G}_{00}$  en forma de una fracción continuada

$$\mathcal{G}_{00} = \frac{1}{u - a_0 - \frac{b_1^2}{u - a_1 - \frac{b_2^2}{u - a_2 - \frac{b_3^2}{u - a_3 - \ddots}}},$$
(53)

la cual podemos emplear en la ec<br/>.(37)para finalmente obtener la respuesta macroscópica

$$\epsilon_M^{LL} = \frac{\epsilon_A}{u} \left( u - a_0 - \frac{b_1^2}{u - a_1 - \frac{b_2^2}{u - a_2 - \frac{b_3^2}{u - a_3 - \ddots}}} \right).$$
(54)

Debemos enfatizar que en esta expressión, los coeficientes de Haydock  $\{a_n, b_n\}$ dependen exclusivamente de la geometría a través de la función característica B(r)y no de la composición del material ni de la frecuencia. Por lo tanto, sólo es necesario calcularlos una vez para una geometría dada y posteriormente pueden emplearse para calcular la respuesta de cualquier metamaterial con dicha geometría con cualquier composición y a cualquier frecuencia, simplemente sustituyendo la variable espectral adecuada u (ec. (27)). Así, con este formalismo podemos calcular la respuesta de sistemas formados por aislantes o metales, con o sin dispersión y con o sin disipación; el operador  $\hat{B}^{LL}$  es hermitiano haya o no haya dispersión o disipación.

Por otro lado, podemos aplicar el hamiltoniano  $\hat{B}^{LL}$  (38) en etapas, notando que multiplicar por  $\hat{K}'$  es trivial en el espacio recíproco. El producto matricial del vector resultante con  $B_{KK'} = B_{K-K'}$  corresponde a una convolución, por lo cual, tras una transformada de Fourier hacia el espacio real, se convierte en un producto trivial por la función característica  $B(\mathbf{r})$ . Finalmente, tomando una transformada de Fourier de regreso al espacio recíproco, el producto escalar por los vectores unitarios  $\hat{K}$ · se vuelve trivial. Esto muestra que podemos aplicar nuestro hamiltoniano repetidas veces para obtener los coeficientes de Haydock sin necesidad de multiplicar ninguna matriz. Eso vuelve muy eficiente el proceso aquí descrito.

## 3 Implementación

La teoría mostrada arriba ha sido implementada en un paquete computacional llamado *Photonic*, el cual ha sido colocado en el *dominio público* [13, 14]. El programa está escrito en el lenguaje *PERL*, el cual es muy expresivo y cuya sintaxis hereda construcciones de lenguajes previos como C, C++, awk, bash, sed, etc. El lenguaje es versátil y flexible, y refleja la filosofía de su creador resumida en frases como hay más de una manera de resolverlo y lo fácil debe ser fácil, lo difícil debe ser posible. Sólo contiene tres tipos de datos, que son escalares, arreglos indexados por un entero y arreglos asociativos indexados por cualquier escalar. Los escalares pueden representar números enteros o reales, cadenas de caracteres, o referencias a otros escalares, arreglos o arreglos asociativos, e incluso, referencias a subrutinas. Los arreglos son dinámicos y pueden crecer o decrecer en ambos extremos o en su interior. Esto permite implementar de manera trivial pilas de datos (stacks), colas fifo, árboles y otras estructuras de datos. Se pueden construir fragmentos de código durante la ejecución de un programa para ejecutarse posteriormente. Esta flexibilidad permite emplear una gran variedad de paradigmas al programar en *PERL*, incluyendo programación procedural, funcional y/o orientada a objetos.

El costo a pagar por la flexibilidad del lenguaje es la velocidad de ejecución. Se ha reportado recientemente que PERL es varias decenas de veces más lento que C para tareas orientadas a procesamiento numérico.[15] Por ello, un grupo de investigadores se abocaron a crear una extensión del lenguaje llamado *Perl Data Language* o *PDL* [16, 17, 18], que permite ligar rutinas numéricas escritas en otros lenguajes como C o *Fortran* para el manejo eficiente de arreglos numéricos, sin sacrificar la flexibilidad y expresividad de *PERL*. Una prueba reciente[15] mostró que *PDL* es competitivo y hasta puede superar en velocidad a códigos nativos en C.

Finalmente, para simplificar el proceso de codificación y volverlo robusto conforme evoluciona el paquete se empleó un sistema de programación de objetos conocido como *Moose*[19]. Este sistema permite definir *clases* que abstraen el comportamiento de los *objetos*, instancias que tienen una serie de *atributos*, datos privados, y *métodos* que definen su comportamiento. Las clases pueden heredar su comportamiento de otras clases o de *roles* que definen las interfases. Contar con una librería de clases permite armar programas que resuelven problemas complejos juntando bloques que ensamblan unos con otros, como las construcciones con bloques de juguetes *Lego*.

#### 3.1 Ejemplo

No explicaremos aquí los detalles de la implementación, pues su comprensión requeriría cierto dominio de los sistemas (Perl, PDL y Moose) empleados. En cambio, mostraremos fragmentos de un pequeño programa para explicar cómo se usa el sistema. El programa íntegro, disponible en la referencia [20], calcula el tensor dieléctrico de una red tetragonal de toroides hechos de cierto material y embebido en una matriz de otro material.

Iniciamos con una serie de *pragmas* y cargando paquetes que serán útiles más adelante

```
#!/usr/bin/env perl
# ...
use strict;
use warnings;
use v5.12;
use Getopt::Long;
```

```
use PDL;
use PDL::NiceSlice;
use PDL::Constants qw(PI);
use Photonic::Geometry::FromB;
use Photonic::LE::NR2::Haydock;
use Photonic::LE::NR2::EpsL;
```

strict y warnings son para pedir al sistema que sea estricto y nos advierta de errores potenciales, v5.12 es para habilitar algunas construcciones semánticas, Getopt es para leer los parámetros desde la línea de comandos al ejecutar el programa, PDL es para usar la interface numérica, NiceSlice para simplificar el manejo de índices en las estructuras de datos y PI es simplemente una constante útil. Los paquetes relacionados con Photonic serán discutidos más abajo. Las componentes LE y NR2 en su nombre indican que usaremos aquellas rutinas relacionadas con la respuesta dieléctrica longitudinal en el límite no retardado y restringido a dos componentes.

A continuación definimos algunos parámetros y el código para leerlos desde la línea de comandos.

```
my $ratio; # b/a for torus
...
my $options=q(
'ratio=f'=>\$ratio,
...
);
...
GetOptions( %options)or usage($options, "Bad options");
usage($options, "Missing options")
unless luall {defined $_}
($ratio, $fraction, @eps_a, @eps_b, $Nxy, $Nz, $Nh);
...
set_autopthread_targ($cores) if defined $cores;;
```

Los parámetros a leer son la razón de los radios del toroide, la fracción de llenado en la celda unitaria, el numero de *voxels* a lo largo de los ejes de la red, los pares de funciones dieléctricas e emplear para los toroides y la matriz, el número de coeficientes de Haydock a emplear y el número de núcleos computacionales a emplear en el cálculo. A continuación se leen y validan las opciones y de ser necesario se envían mensajes de error. La rutina set\_autopthread\_targ establece el número de núcleos computacionales que deseamos usar al paralelizar el programa.

Como indicamos arriba, la geometría queda definida a partir de la función característica, cuyo valor es 1 dentro del toroide y 0 en su exterior. Primero calculamos los dos radios del toroide en términos de la fracción de llenado deseada.

```
my ($Nxy2, $Nz2)=(2*$Nxy+1, 2*$Nz+1);
my $unit_cell_volume=$Nxy2*$Nxy2*$Nz2;
my $small_radius=($fraction*$unit_cell_volume/(2*PI**2*$ratio))**(1/3);
my $large_radius=$ratio*$small_radius;
warn "Tori overlap" if $small_radius>$Nz
or $large_radius+$small_radius>$Nxy;
```

Luego creamos un arreglo 3D representando a la celda unitaria y lo poblamos de unos y ceros de acuerdo a la función característica deseada.

```
my $r=zeroes($Nxy2, $Nxy2, $Nz2)->ndcoords
        -pdl($Nxy, $Nxy, $Nz); #positions array
my $B=(sqrt($r((0))**2+$r((1))**2)-$large_radius)**2
        +$r((2))**2 < $small_radius**2;</pre>
```

La rutina **zeroes** produce el arreglo 3D de ceros con el número de dimensiones y el tamaño solicitado, el *método* ndcoords asigna a cada punto del arreglo un vector en 3D con las coordenadas de dicho punto. Al restar las coordenadas del centro del arreglo, asignamos a la variable **\$r** las coordenadas de los puntos del arreglo con respecto al centro. Procesando dichas coordenadas obtenemos la distancia de cada punto al círculo alrededor del cual se forma el toroide y en la variable **\$B** guardamos un 1 o un 0 dependiendo de si estamos suficientemente cerca de la generatriz o no.

A continuación inicializamos dos objetos que codifican la geometría del sistema empleando la función característica.

```
my $gx=Photonic::Geometry::FromB->new(B=>$B, Direction0=>pdl(1,0,0));
my $gz=Photonic::Geometry::FromB->new(B=>$B, Direction0=>pdl(0,0,1));
```

Las clases **Geometry** saben cómo calcular la red de *voxels*, pero también cómo calcular la red recíproca, y los vectores recíprocos normalizados  $\hat{K}$ , entre otros métodos relacionados a la geometría del sistema, a partir del atributo B que inicializamos con la función característica **\$B**. Sin embargo, para ello necesita saber en qué dirección apunta el vector de Bloch, asociado al atributo Direction0. Emplearemos entonces dos *geometrías*, una con ondas viajando en la dirección  $\hat{x}$  y otra viajando en la dirección  $\hat{z}$ , i.e., a lo largo del plano y del eje del toroide, respectivamente.

Con las dos geometrías podemos inicializar dos objetos para calcular coeficientes de Haydock.

```
my $nrx=Photonic::LE::NR2::Haydock->new(geometry=>$gx, nh=>$Nh);
my $nrz=Photonic::LE::NR2::Haydock->new(geometry=>$gz, nh=>$Nh);
```

Finalmente, para cada pareja de funciones dieléctricas, calculamos la respuesta dieléctrica macroscópica longitudinal, proyectada sobre la dirección del vector de Bloch establecida arriba.

El objeto EpsL sabe calcular la respuesta dieléctrica longitudinal y se inicializa con un objeto que calcula coeficientes de Haydock, con el número de coeficientes que se desea usar y con las funciones dieléctricas de ambas componentes. Finalmente, el *método* epsL regresa el *valor* de la función dieléctrica macroscópica deseada.

El resto del programa simplemente imprime el resultado y mensajes de error de ser necesario.

```
say sprintf "%.4f %d %d %d %.4f %.4f %.4f %.4f %.4f %.4f",
$ratio, $Nxy, $Nz, $Nh, $fraction, $gx->f, $ea->re, $eb->re,
$resultx->re, $resultz->re;
say "x-no-covergió" unless $epsx_calc->converged;
say "z-no-covergió" unless $epsz_calc->converged;
}
sub usage {
...
}
```

Podemos correr el programa como en el siguiente ejemplo, en el que calculamos las propiedades de una red tetragonal de  $161 \times 161 \times 41$  voxeles con toroides cuyas funciones dieléctricas son  $\epsilon_b = 5$ , 10, inmersos en el vacío,  $\epsilon_a = 1$ , con una fracción de llenado nominal f = 0.3, con una razón entre los radios del círculo mayor al circulo menor  $R_>/R_< = 3$  y empleando 100 coeficientes de Haydock, usando en el cálculo 4 núcleos de la unidad de procesamiento,

```
./toroid.pl -ratio 3 -fraction .3 -Nz 20 -Nxy 80 \
        -eps_a 1 -eps_b 5 -eps_a 1 -eps_b 10 -Nh 100 -cores 4
```

obteniendo unos segundos después la siguiente tabla:

#ratio Nxy Nz Nh f-nom f-act medium torus epsxx epszz
3.0000 80 20 100 0.3000 0.3004 1.0000 5.0000 1.7228 1.6859
3.0000 80 20 100 0.3000 0.3004 1.0000 10.0000 2.1836 2.0152

Las últimas dos columnas nos proporcionan las componentes del tensor dieléctrico macroscópico de este sistema.

#### 3.2 Extensiones

Además de la teoría no retardada desarrollada en detalle en la sección 2.5, hemos desarrollado la teoría para poder calcular la respuesta dieléctrica en presencia de retardamiento (sección 2.4) y para sistemas no binarios, con tres o más componentes. También hemos extendido la teoría para poder calcular los campos electromagnéticos microscópicos y a partir de ellos calcular propiedades no lineales. Estas extensiones han sido incorporadas en el paquete *Photonic*.

### 3.3 Instalación

Para instalar el paquete *Photonic* es necesario instalar primero el paquete *PDL*. En un sistema *linux* basta emplear el comando cpanm -look PDL desde una línea de comandos. Debe leerse entonces el archivo INSTALLATION e instalar su lista de prerrequisitos manualmente para posteriormente invocar los comandos perl Makefile.PL, make, make test y make install. Posteriormente, el comando cpanm Photonic instala de manera automática nuestro sistema. Una vez instalado, el comando perldoc Photonic da acceso al manual en línea.

# 4 Resultados

En esta sección enumeraremos algunos de los resultados que hemos obtenido con la teoría y códigos descritos arriba.

### 4.1 Dicroísmo lineal y transmisión extraordinaria

El punto de inicio de nuestros cálculos es la función característica  $B(\mathbf{r})$ , consistente en unos y ceros, dependiendo de si r se halla dentro del material B o A. Al discretizar el espacio real en 2D,  $B(\mathbf{r})$  se vuelve una representación binaria de una imagen pixelada. Por lo tanto, nuestro programa puede alimentarse *literalmente* de una imagen pixelada de alto contraste. Esto permite manipular la imagen usando herramientas gráficas y calcular las propiedades ópticas del sistema resultante. Ilustramos esto con la fig. 15, en cuyo lado izquierdo mostramos un corte de una red rectangular de agujeros cilíndricos con sección transversal elíptica en una matriz de plata. Manipulamos gráficamente la razón de aspecto de la red, y la excentricidad y orientación de las elipses. En la figura hemos elegido el valor 2 para la razón de aspecto de la red y escogimos 1.8 para la razón entre los semiejes de las elipses. En el lado derecho mostramos el espectro de reflectancia a incidencia normal de una película delgada, de 100Å de ancho, formada por este metamaterial. Mostramos dos conjuntos de datos, pues el material es anisótropo. Para cierta polarización, casi horizontal, el material se comporta como un metal ordinario con una alta reflectancia, cercana a R = 1. Sin embargo, para una polarización ortogonal, casi vertical hay un espectro de reflectancia con un mínimo profundo alrededor de  $\hbar\omega = 2.4eV$ , en que nuestra película muestra un dicroísmo extremo, i.e., casi toda la luz se refleja para una polarización y casi nada para la polarización ortogonal.[21] El mínimo de reflectancia puede entonarse a través de toda la región visible mediante cambios pequeños en la orientación  $\theta$  de las elipses. El motivo del dicroísmo extremo es que en la dirección vertical los caminos conductores se hallan casi estrangulados, pero abiertos. Por tanto, mientras que el sistema es un buen conductor para campos horizontales, es un mal conductor para campos verticales y para campos que oscilan rápidamente el sistema se comporta como un dieléctrico con resonancias relacionadas a los plasmones localizados en los cilindros. Por tanto, la permitividad en la dirección vertical es negativa a bajas frecuencias (comportamiento metálico) pero positiva y con resonancias a altas frecuencias (comportamiento dieléctrico). Interpolando entre ambos comportamientos, para alguna frecuencia intermedia la respuesta empata con la del



Figura 15: (Izquierda)Red rectangular con parámetros de red  $L_y = 2L_x$  de agujeros cilíndricos con razón de semiejes a = 1.8b en una matriz de plata. El semieje mayor está rotado  $\theta = 74^{\circ}$  con respecto a la vertical. (Derecha arriba) Espectro de reflectancia de una película delgada de ancho 100Åiluminada normalmente por luz linealmente polarizada a lo largo de los ejes principales del tensor dieléctrico, cuya dirección se indica a la izquierda y a la derecha abajo. Como referencia, se muestra la reflectancia de una película homogénea con la misma cantidad de Ag (linea continua). (Derecha abajo) Direcciones principales del tensor dieléctrico.



Figura 16: (Izquierda) Película de Ag depositada en vidrio con una red cuadrada de parejas de agujeros en forma de prismas rectangulares rellenos de un dieléctrico con permitividad  $\epsilon_b$ . El sistema está parametrizado por el ancho W y altura H de los primas y el desplazamiento  $\boldsymbol{\rho}$  entre parejas de agujeros en la celda unitaria. (Derecha) Dicroísmo circular de películas de 100nm de ancho con parámetros entonados para maximizar el dicroísmo a una frecuencia preestablecida (puntos).

vacío y el material adquiere una transparencia extraordinaria, lo cual contrasta con la alta reflectancia para una polarización ortogonal.

### 4.2 Dicroísmo circular

En la fig. 16 mostramos un sistema formado por una red cuadrada de parejas de agujeros en forma de prismas rectangulares en una película delgada de Ag colocada sobre un sustrato de vidrio. Los agujeros están rellenos de un dieléctrico con permitividad  $\epsilon_b$ . El sistema está parametrizado por el ancho W y alto H de los prismas y por el desplazamiento relativo  $\rho$  entre cada pareja. Notamos que este sistema no tiene simetría de reflexión a lo largo del plano, excepto para ciertos valores particulares del desplazamiento y que, aunque simétrica, su respuesta dieléctrica macroscópica es no hermitiana. Por lo tanto, los ejes principales en los que se diagonaliza el tensor dieléctrico de esta estructura son en general complejos, los modos propios respectivos corresponden a polarización elíptica y dependen en general de la frecuencia. Podemos aprovechar estas características del sistema para diseñar varios dispositivos ópticos. Como el cálculo reseñado en la sec. 2.6 es muy eficiente, podemos calcular espectros completos para cada una de las combinaciones de parámetros que surjan en una búsqueda automatizada del óptimo de cualquier propiedad deseada. [22] Por ejemplo, hemos hallado las combinaciones de parámetros que nos permiten obtener un máximo de dicroísmo circular, la diferencia entre la absortancia de la película cuando es iluminada con polarización circular derecha e izquierda, y situarlo en cualquier frecuencia deseada. 22 En el lado derecho de la fig. 16 mostramos fragmentos de los espectros de dicroísmo obtenidos, mostrando que podemos entonar su máximo a cualquier energía deseada en el espectro visible. Hacemos notar que el dicroísmo circular de los materiales naturales suele ser de apenas unas partes en mil, mientras que aquí hemos encontrado señales de orden uno.

#### 4.3 Magnetismo

La permitividad obtenida de acuerdo al procedimiento descrito en la sección 2.3 conduce a una permitividad que en general es *no-local*, es decir,  $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$  depende explícitamente del vector de onda  $\mathbf{k}$  además de depender de la frecuencia  $\omega$ . Una de las consecuencias esta no-localidad o *dispersión espacial*, es que la permitividad incluye información sobre la respuesta magnética del sistema. Para entender cómo un sistema no magnético adquiere propiedades magnéticas cuando se excita con un campo eléctrico cuya longitud de onda es del orden de las otras escalas de distancia del sistema, consideremos un cilindro metálico. Si iluminamos el cilindro con un campo eléctrico induciría corrientes en una dirección en la mitad del cilindro y en la dirección opuesta en la otra mitad, i.e., induciría una corriente que circularía alrededor del cilindro, generando un dipolo magnético de origen eléctrico.

Un procedimiento simple para extraer la respuesta magnética a partir de la dispersión espacial de la respuesta dieléctrica consiste en analizar la relación de dispersión de las ondas electromagnéticas en el medio no local,

$$k^2 = \epsilon_M(k,\omega) \frac{\omega^2}{c^2},\tag{55}$$

donde por simplicidad ignoramos el carácter tensorial de  $\epsilon$  y vectorial de k. Hacemos una expansión de Taylor

$$\epsilon_M(k,\omega) = \epsilon_M(0,\omega) + \frac{k^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \epsilon_M(0,\omega) + \dots, \qquad (56)$$

respecto al número de onda para k's pequeñas. El término lineal está ausente de esta expansión si el sistema es invariante frente a inversiones temporales. Sustitución en la ec. (55) conduce aproximadamente a

$$k^{2} = \left(\epsilon_{M}(0,\omega) + \frac{k^{2}}{2}\frac{\partial^{2}}{\partial k^{2}}\epsilon_{M}(0,\omega)\right)\frac{\omega^{2}}{c^{2}}.$$
(57)

Despejando  $k^2$  obtenemos

$$k^{2} = \frac{\epsilon_{M}(0,\omega)}{1 - \frac{\omega^{2}}{2c^{2}}\frac{\partial^{2}}{\partial k^{2}}\epsilon_{M}(0,\omega)}\frac{\omega^{2}}{c^{2}},$$
(58)

la cual podemos escribir como

$$k^2 = \epsilon_M(\omega)\mu_M(\omega)\frac{\omega^2}{c^2},\tag{59}$$

donde definimos  $\epsilon_M(\omega)$  como el límite local  $\epsilon_M(k \to 0, \omega)$  de la permitividad no local, y donde identificamos la permeabilidad local

$$\mu_M(\omega) = \frac{1}{1 - \frac{\omega^2}{2c^2} \frac{\partial^2}{\partial k^2} \epsilon_M(0,\omega)}.$$
(60)

171



Figura 17: (Izquierda) Red cuadrada de parejas de cilindros metálicos cortados (split rings) anidados. Los cilindros están descritos por el modelo de Drude con frecuencia de plasma  $\omega_p = 20c/d$ , con d el parámetro de red. (Derecha) Permeabilidad magnética obtenida a partir de la dispersión espacial de la permitividad y a partir de un modelo simple para cilindros con paredes infinitesimales pero con la misma conductividad superficial. Los radios internos y externos de los anillos metálicos son 0.26d, 0.32d, 0.34d, y 0.4d y están interrumpidos por brechas de tamaño 0.1d. Se emplearon 350 pares de coeficientes de Haydock en una retícula de  $401 \times 401$  pixeles.

En la fig. 17 mostramos un sistema formado por una red cuadrada, de anillos concéntricos truncados. Calculamos con *Photonic* la permeabilidad no local del sistema, y a partir de su dispersión espacial obtuvimos la permeabilidad magnética.[23] Del lado derecho mostramos el espectro de la permeabilidad  $\mu_M(\omega)$  como función de lq frecuencia normalizada  $qd = \omega d/c$  para un sistema de anillos metálicos, descritos por una respuesta de Drude con frecuencia de plasma  $\omega_p = 20c/d$ , con d el parámetro de red. Los radios internos y externos de los anillos son 0.26d, 0.32d, 0.34d, y 0.4d y están interrumpidos por brechas de tamaño 0.1d. Los cálculos fueron realizados en una retícula de 401 × 401 pixeles y se emplearon 350 pares de coeficientes de Haydock. Como referencia, se muestran resultados de un cálculo simplificado para una red de anillos infinitamente delgados pero con una conductividad superficial que corresponde a los anillos sólidos. Hay un buen acuerdo entre ambos resultados. Se observa que alrededor de qd = 0.3 aparece una resonancia en la permeabilidad, arriba de la cual adquiere valores negativos, por lo cual este sistema podría emplearse para construir un metamaterial izquierdo.

#### 4.4 Respuesta no lineal

Además de obtener la respuesta macroscópica, es posible obtener con una ligera extensión del formalismo presentado arriba el campo eléctrico microscópico en el seno de un metamaterial. El campo microscópico permite hacer cálculos de propiedades no lineales, tales y como la generación de segundo armónico proporcional al cuadrado del campo. En sistemas centrosimétricos, aquellos con simetría de inversión, no se pueden llevar a cabo procesos cuadráticos, en los que se absorben dos foto-



Figura 18: Magnitud y dirección del campo lineal microscópico (izquierda) y la densidad de carga inducida (derecha) en un metamaterial formado por una red de agujeros en forma de letra T en una matriz de Ag excitado por un campo polarizado en la dirección vertical para dos frecuencias resonantes. El carácter dipolar y cuadrupolar de las resonancias se advierte en los signos de la carga inducida y las direcciones del campo.

nes y se emite un fotón con la suma de sus energías. En particular, no se pueden llevar a cabo procesos de generación de segundo armónico, en que dos fotones de frecuencia  $\omega$  se combinen entre sí para dar lugar a un fotón de frecuencia  $2\omega$ . Sin embargo, en la vecindad de superficies estos procesos sí están permitidos, aunque para superficies centrosimétricas, las contribuciones de distintas partes opuestas de la superficie se cancelan mutuamente. Por esto es interesante calcular la respuesta no lineal de metamateriales formados por materiales centrosimétricos pero con geometrías no centrosimétricas. Como un ejemplo,[24] en la fig. 18 mostramos el campo lineal microscópico y la densidad de carga inducida en una red de agujeros no centrosimétricos con forma de letra T en el seno de una película de Ag. Debido a la no homogeneidad del campo lineal, en este sistema se induce una polarización cuadrática que oscila en el segundo armónico, como ilustra la fig. 19 para diversas direcciones de polarización del campo lineal macroscópico y diferentes frecuencias. Notamos que los patrones no lineales son simétricos, como el sistema, ante una reflexión  $y \leftrightarrow -y$  cuando el campo  $E_M$  apunta en las direcciones  $\hat{x}$  o  $\hat{y}$ , pero que

esta simetría se pierde cuando el campo apunta en otras direcciones como la  $\hat{x} + \hat{y}$ .



Figura 19: Magnitud y dirección de la polarización cuadrática no lineal inducida en el segundo armónico para el mismo sistema descrito en la fig. 18 para diversas frecuencias y diversas direcciones del campo eléctrico macroscópico lineal.



Figura 20: Distintas componentes de la susceptibilidad no lineal para generación de segundo armónico  $\chi_{ijk}$  para el sistema descrito en la figura 18 como función de la energía de los fotones fundamentales. Distintas curvas corresponden a las contribuciones de zonas a distintas distancias de la superficie.

A partir de la polarización no lineal podemos calcular todas las componentes del tensor de susceptibilidad no lineal del metamaterial y podemos optimizarlo a través de los parámetros geométricos del sistema. En la fig. 20 mostramos las componentes  $\chi_{ijk}(\omega, \omega; 2\omega)$  no nulas de la susceptibilidad cuadrática para la generación de segundo armónico en el sistema. La susceptibilidad típica de un material no centrosimétrico es del orden de  $1/nea_B$ , donde n es la densidad de número atómica, e la carga del electrón y  $a_B$  el radio de Bohr. Nuestros resultados muestran que un metamaterial hecho de componentes centrosimétricas pero con una geometría no centrosimétrica puede alcanzar en resonancia susceptibilidades del orden de 100/nea, con a el parámetro de red. Por lo tanto, para materiales nanoestructurados, la respuesta no lineal de nuestros metamateriales puede ser competitiva con la de los materiales no lineales usuales.

# 5 Conclusiones

En este trabajo hemos presentado una introducción a los metamateriales y a algunas de sus múltiples propiedades, algunas exóticas, y aplicaciones. Luego desarrollamos una teoría basada en la identificación de operadores cuyo promedio tiene significado físico y a partir de los cuales podemos obtener las funciones respuesta macroscópicas del sistema y sus propiedades ópticas. También presentamos el método recursivo de Haydock, el cual aprovecha una analogía entre el cálculo de funciones respuesta macroscópicas y funciones de Green proyectadas para obtener algoritmos computacionales muy eficientes. Los diversos métodos desarrollados han sido implementados en paquetes computacionales modulares que han sido puestos en el dominio público. Como algunos ejemplos de su uso, presentamos el cálculo, diseño y optimización de propiedades ópticas lineales y no lineales como son la transmitancia extraordinaria, el dicroísmo lineal, el dicroísmo circular, las resonancias magnéticas y la generación de segundo armónico.

# 6 Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por DGAPA-UNAM mediante el proyecto IN111119. Parte del trabajo aquí reportado fue realizado en colaboración con varios colegas, incluyendo a Guillermo P. Ortiz, Bernardo S. Mendoza, José Samuel Pérez-Huerta, Lucila Juárez Reyes y Raksha Singla, así como sus grupos de trabajo y estudiantes.

# Referencias

- [1] Virtual Institute for Artificial Electromagnetic Materials and Meta-materials. https://www.metamorphose-vi.org/
- [2] An introduction to metamaterials and nanophotonics, Constantin Simovski y Sergei Tretyakov, (Cambridge University Press, Cambridge, 2021), ISBN:9781108492645. http://www.cambridge.org/9781108492645

- [3] Plasmons, W. Luis Mochán, en Reference Module in Materials Science and Materials Engineering, (Elsevier, Amsterdam, 2016) ed. por Saleem Hashmi. ISBN 9780128035818, doi:10.1016/B978-0-12-803581-8.01192-9.
- [4] An investigation of the origin of the color of the Lycurgus cup by analytical transmission electron-microscopy, Barber DJ y Freestone IC, Archaeometry 32 33-45 (1990). doi:10.1111/J.1475-4754.1990.TB01079.X.
- [5] Theory of the optical properties of ionic crystal cubes, Ronald Fuchs, Physical Review B 11 1732, (1975). doi:10.1103/PhysRevB.11.1732.
- [6] Experimental Verification of a Negative Index of Refraction, Shelby, R. A., D. R. Smith, and S. Schultz. Science 292 77–79 (2001). doi:10.1126/science.1058847.
- [7] Chen, Hou-Tong, Antoinette J. Taylor, and Nanfang Yu, A Review of Metasurfaces: Physics and Applications, Reports on Progress in Physics 79 076401 (2016). doi: 10.1088/0034-4885/79/7/076401.
- [8] Metalenses at Visible Wavelengths: Diffraction-Limited Focusing and Subwavelength Resolution Imaging, Khorasaninejad, Mohammadreza, Wei Ting Chen, Robert C. Devlin, Jaewon Oh, Alexander Y. Zhu, and Federico Capasso, Science 352 1190–94 (2016). doi:10.1126/science.aaf6644.
- [9] Electromagnetic response of systems with spatial fluctuations. I. General formalism, W. Luis Mochán y Rubén G. Barrera. Phys. Rev. B 32 4984 (1985). doi: 10.1103/PhysRevB.32.4984.
- [10] Efficient homogenization procedure for the calculation of optical properties of 3D nanostructured composites, W. Luis Mochán, Guillemo P. Ortiz y Bernardo S. Mendoza, Optics Express 18 22119 (2010). doi:10.1364/OE.18.022119.
- [11] Macroscopic optical response and photonic bands, José Samuel Pérez-Huerta, Guillermo P. Ortiz, Bernardo S. Mendoza y W. Luis Mochán, New Journal of Physics 15 043037 (2013). doi:10.1088/1367-2630/15/4/043037.
- [12] The Recursive Solution of the Schrödinger Equation, R. Haydock, Solid State Physics 35 215 (1980) ed. por H. Ehrenreich, F. Seitz y D. Turnbull.
- [13] W. Luis Mochán, Guillermo Ortiz, Bernardo S. Mendoza, José Samuel Pérez-Huerta, Lucila Juárez Reyes, Raksha Singla y Merlyn Jaqueline Juárez-Gutiérrez, *Photonic*, https://metacpan.org/pod/Photonic.
- [14] W. Luis Mochán, Guillermo Ortiz, Bernardo S. Mendoza, José Samuel Pérez-Huerta, Lucila Juárez Reyes, Raksha Singla y Merlyn Jaqueline Juárez-Gutiérrez, *Photonic*, https://github.com/wlmb/Photonic.
- [15] W. Luis Mochán, Perl Benchmark https://wlmb.github.io/2021/10/03/ pdl/.

- [16] Perl Data Language: Scientific Computing with Perl. http://pdl.perl. org/.
- [17] PDL https://metacpan.org/pod/PDL.
- [18] Perl Data Language (PDL). https://github.com/PDLPorters/pdl.
- [19] Moose A postmodern object system for Perl 5. https://metacpan.org/ pod/Moose.
- [20] Ejemplo de uso de *Photonic* para el cálculo de las propiedades ópticas de una red de toroides.
- [21] Birefringent Nanostructured Composite Materials, Bernardo S Mendoza y W. Luis Mochán, Physical Review B 85 125418 (2012). doi:10.1103/PhysRevB.85.125418.
- [22] Tailored Optical Polarization in Nanostructured Metamaterials, Bernardo S. Mendoza y W. Luis Mochán, Physical Review B 94 195137 (2016). doi:10.1103/PhysRevB.94.195137.
- [23] Magnetic Response of Metamaterials, Lucila Juárez-Reyes y W. Luis Mochán, Physica Status Solidi (b) 255 1700495 (2018). doi:10.1002/pssb.201700495.
- [24] Second-Harmonic Generation in Nanostructured Metamaterials, Ulises R. Meza, Bernardo S. Mendoza y W. Luis Mochán, Physical Review B 99 125408 (2019). doi:10.1103/PhysRevB.99.125408.

Ondas de espín en Cristales Magnónicos. Dr. César Leonardo Ordóñez Romero Instituto de Física, UNAM.

Ondas de espín en películas delgadas.

Durante las últimas décadas los cristales magnéticos han sido considerados como elementos de gran importancia no solamente para el estudio de la dinámica de la magnetización sino también para el desarrollo de aplicaciones emergentes en el campo del procesamiento de señales a frecuencias de microondas<sup>1-36</sup>. Su capacidad de exhibir características de dispersión radicalmente modificadas con respecto a los medios no estructurados, habilitan un nuevo conjunto de potenciales aplicaciones en las que se incluyen líneas de retardo controladas por corriente, transistores magnónicos, filtros de microondas, y sensores magnónicos, por mencionar algunos<sup>24-36</sup>. Dependiendo de la aplicación final y del rendimiento deseado los cristales magnónicos pueden ser implementados usando una gran variedad de diferentes técnicas entre las que se encuentran: ataque químico, implantación de iones, depósito de metales, o cualquier otro método que pueda influenciar algún parámetro de forma periódica.<sup>1-</sup> <sup>25</sup> Hasta ahora, sin embargo, las mejores características han sido alcanzadas por los cristales magnónicos basados en películas delgadas de granate de itrio hierro (YIG) micro estructuradas mediante micro fotolitografía y el subsecuente ataque químico. Este tipo de cristales magnéticos han presentado pequeñas pérdidas de inserción y bandas de rechazo más delgadas y más profundas que los implementados por otras técnicas.

Hasta ahora, una gran cantidad de estudios teóricos y experimentales han mostrado el comportamiento de las características de transmisión de los cristales magnónicos como función de los parámetros geométricos, modos de propagación y condiciones de frontera.<sup>10-19</sup> Estos resultados han sido cruciales para proponer soluciones innovadoras a diferentes problemas tecnológicos.<sup>20-32</sup> Sin embargo, ninguno de estos estudios han mostrado de forma clara el comportamiento o las necesidades físicas de los cristales magnéticos para mostrar atributos significativos en la transmisión digital de alta velocidad. En este trabajo, nosotros mostramos un estudio detallado de la influencia de los cristales magnéticos en la propagación de pulsos de ondas de espín de superficie como función del ancho del pulso o, en términos de comunicaciones digitales, la tasa de transmisión.

#### Sistema experimental

El sistema experimental está basado en una delgada y uniforme película de YIG la cual fue crecida epitaxialmente en un plano cristalográfico 111 sobre de un substrato de granate de galio gadolinio (GGG). La muestra utilizada fue de 35 mm de largo, 2 mm de ancho y 8.3micras de espesor. La estructuración de la muestra fue realizada usando la técnica de fotolitografía y ataque químico. La estructura magnónica consta de 12 surcos de 70 micras de ancho espaciadas 330micras, con una profundidad de una micra. La distribución de los surcos es perpendicular a la dirección de propagación de las ondas de espín.



Figura 1. Diagrama del sistema experimental.

El sistema experimental usado para excitar y detectar las ondas de espín está basado en una línea de retardo estándar y una sonda magneto inductiva motorizada y controlada por computadora. La figura uno muestra un diagrama del sistema experimental donde se observan las antenas de microondas de excitación y detección, el cristal magnónico, la sonda magneto inductiva, el sistema coordenado y la dirección del campo magnético de saturación. Con el objetivo de habilitar la configuración de ondas de espín de superficie, el campo magnético de saturación se colocó paralelo a la superficie de la película y perpendicular a la dirección de propagación de las ondas de espín. El valor nominal del campo magnético es de 770 gauss para todas las mediciones. La estructura de la línea de retardo de ondas de espín consiste en un par de antenas formadas por alambres de cobre de 20 micras de diámetro colocadas directamente sobre la superficie de la película. La separación de las antenas es de 8 mm y garantiza que la estructura periódica se encuentra completamente colocada entre ellas. La característica de amplitud en frecuencia o espectro de transmisión del cristal magnónico fue medido mediante el uso de un analizador vectorial de redes conectado directamente a la estructura de excitación y detección.

Las mediciones en dominio del tiempo y del espacio de la distribución de la energía y la propagación de las ondas de espín fueron llevadas a cabo por el sistema de sonda magneto inductiva. Este arreglo experimental consiste en 3 platinas de traslación motorizadas y controladas por computadora, que sostienen y desplazan una sonda magneto inductiva. La sonda es un pequeño aro realizado con un alambre de oro de 20micras de diámetro. Con el
objetivo de detectar una señal de buena intensidad en el sistema, una sonda fue colocada en una posición fija en el plano yz y trasladada a lo largo del eje x. La sonda fue colocada lo más cercano posible a la superficie de la película YIG. El barrido de la sonda a lo largo del eje x fue controlado por computadora usando pasos iguales de 20micras para todas las mediciones. Es importante mencionar que la presencia de la sonda y/o su movimiento a lo largo de la muestra no influye en la forma de la característica de amplitud de frecuencia de los resultados.

Las ondas propagantes de espín de superficie fueron excitadas inyectando un tren de pulsos cortos de microondas en la antena de entrada. Un diodo interruptor ultra rápido fue utilizado para producir los pulsos de microondas modulando la intensidad de una señal de onda continua proveniente de un oscilador de microondas a una frecuencia f. La duración de los pulsos fue variada entre 10ns y 110ns manteniendo para todas las mediciones una tasa de repetición de 1kHz para evitar calentamiento de la muestra. La detección de las ondas se llevó a cabo conectando la sonda magneto inductiva a un osciloscopio y a un analizador de espectros. El rango de frecuencias para las mediciones fue colocado entre 3.9 y 4.5GHz y el paso de barrido de 5MHz. Este arreglo experimental nos permitió medir el perfil temporal de los pulsos transmitidos en tiempo real resolviendo la propagación de las ondas de espín.

#### Resultados

La figura 2 muestra la característica de amplitud en frecuencia de las ondas de espín para un cristal magnónico completo. La gráfica fue medida en el régimen de onda continúa utilizando un analizador de redes vectoriales conectado a la estructura de línea de retardo. La figura muestra la potencia transmitida por medio de las ondas de espín entre las antenas como función de la frecuencia. Como se espera, la presencia de la estructura de periódico resulta en la formación de bandas prohibidas en el espectro de transmisión localizadas en 3 diferentes frecuencias y con 3 diferentes anchos de banda. La frecuencia central de las bandas prohibidas son 4.075GHz, 4.145GHz y 4.207GHz con anchos de banda de 23, 34, y 27 MHz, respectivamente. La alta calidad del cristal magnónico se observa claramente en la profundidad de las bandas, la cual es mayor a 20 dB en todos los casos.



Figura 2. Característica de transmisión en frecuencia del cristal magnónico completo.

La figura 3 muestra un conjunto de datos del espectro de transmisión de las ondas de espín en un cristal magnónico para diferentes anchos de pulso. Las curvas del contorno representan la intensidad normalizada de las ondas de espín, graficadas en una escala logarítmica, como función de la frecuencia transmitida y la posición de la sonda a lo largo del cristal magnónico. La intensidad normalizada de las ondas de espín fue calculada integrando el cuadrado del correspondiente perfil temporal de voltaje para cada posición y para cada frecuencia de los pulsos de ondas de espín. El intervalo de integración es de 1µs. Esta figura muestra la intensidad normalizada de las ondas de espín como función de la distancia propagada y de la frecuencia transmitida. La figura fue construida utilizando los datos de cuatro diferentes pulsos de excitación, en un rango entre 25ns y 100ns. Con pulsos de excitación cortos, la formación de las bandas prohibidas es casi indistinguible, mientras que con pulsos largos, las bandas se muestran claramente formadas desde posiciones cercanas a 2mm del extremo inicial. Las oscilaciones espaciales de la intensidad están presentes en todas las bandas y dependen en parte de la posición de los surcos del cristal magnónico del comportamiento de las ondas propagantes en estructuras periódicas, las cuales son explícitamente entendidas usando el teorema del Bloch.



Figura 3 Curvas de contorno de la distribución de la energía de las ondas de espín como función de la posición de la sonda y de la frecuencia para diferentes anchos de pulso de excitación. (a) 25ns, (b) 50ns, (c) 75ns, (d) 100ns.

Con el objetivo de entender la razón por la cual la presencia de las bandas prohibidas depende del ancho de los pulsos inyectados, se llevaron a cabo mediciones de la potencia transmitida utilizando un analizador de espectros a la entrada y a la salida del dispositivo. La figura 4 muestra estas mediciones con la misma escala en frecuencia. En la figura es observable que a medida que el ancho del pulso incrementa, el espectro muestra 2 tendencias: Por un lado, el ancho de banda del espectro se vuelve más estrecho y, por otra parte, los picos se vuelven más intensos. Ahora, comparando los espectros de entrada y salida es observable: Primero, que hay un mecanismo de atenuación distribuido a lo largo de todo el espectro el cual es ocasionado por las características pérdidas de propagación, y segundo, que la atenuación adicional visible en todos los casos centrada en una frecuencia de 4.075GHz con un ancho de línea de 23MHz es atribuible a la presencia de la estructura periódica. Es interesante que este segundo efecto debido al cristal magnónico es claramente visible en la figura 4(a) y no tan claramente en su correspondiente figura temporal Fig 3(a). Esto significa que aún cuando el análisis espectral nos confirma que el cristal magnónico está funcionando como un filtro para pulsos cortos, los datos con resolución temporal muestran claramente que no se está filtrando las frecuencias de las bandas prohibidas.



Figura 4. Espectro de transmisión de los pulsos de ondas de espín para diferentes anchos de pulso a la entrada de la estructura (en rojo) y a la salida (azul)

Siguiendo con esta discusión, las figuras 5 y 6 muestran un conjunto de gráficas de perfiles temporales de ondas de espín propagantes como función de la posición de la sonda para 3 diferentes frecuencias. La figura 5 muestran los datos resultantes de un pulso de excitación con una duración de 100ns, mientras que la figura 6 presenta los datos de un pulso de 25ns. Las trazas de contorno mostradas en las sub figuras (a) - (c) de cada figura fueron construidas colocando como columnas los perfiles temporales de las excitaciones de espín medidas con el osciloscopio para todas las posiciones de la sonda a lo largo de la propagación. Las 3 frecuencias específicas mostradas en las figuras corresponden (a) la frecuencia de máxima transmisión, (b) la frecuencia central de la primera banda prohibida, y (c) la frecuencia central de la segunda banda prohibida. Todas las figuras son graficadas usando la misma escala lineal para todos los ejes y usando el mismo mapa de colores. Las sub gráficas (d)- (f) en la izquierda muestran la intensidad de la envolvente de los pulsos en el dominio del tiempo para las 3 frecuencias específicas y 3 posiciones de la sonda. En la parte izquierda Se pueden observar las curvas experimentales y en la parte derecha las simulaciones teóricas. las gráficas experimentales fueron obtenidas realizando cortes verticales de las curvas de contorno en las posiciones de la sonda de 1mm, 3mm y 5mm, medidos desde la antena de excitación.



Figura 5. Distribución de intensidad temporal de las ondas de espín como función de la posición de la sonda para tres frecuencias. A) 4.010GHz (banda de transmisión), b) 4.075GHz (banda prohibida) y c) segunda banda prohibida. Para un pulso de 100ns.

Las figuras 5 y 6 muestran la evolución de los perfiles temporales de intensidad de los pulsos de ondas de espín dentro de un cristal magnónico para todas las posiciones de la sonda. De las curvas de contorno (a) - (c), es posible observar el retraso en el tiempo experimentado por los pulsos cuando la sonda se mueve alejándose de la antena de excitación, este retraso exhibe una pendiente en la gráfica de contorno de la cual es posible extraer la velocidad de grupo de los pulsos propagantes. Adicionalmente, como es esperado, la influencia de la curva de dispersión de las ondas de superficie muestra su efecto característico desplegando

velocidades de grupo más lentas en el rango de excitación de las constantes de onda cuando la frecuencia incrementa. Esto es claramente observable con el cambio de pendiente en las sub gráficas (a) – (c) y en el tiempo de llegada en las gráficas (d) – (f). La velocidad de grupo para las frecuencias analizadas este 69767m/s a 4.01GHz, 58823m/s a 4.075GHz, y 52631m/s a 4.145GHz. Estos valores concuerdan bien con los cálculos teóricos de la velocidad de grupo extraída de la derivada de la curva de dispersión. Otros observables son (i) la característica atenuación de las ondas de espín mostrada en la disminución de la intensidad, (ii) la influencia del cristal magnónico claramente mostrado en las sub gráficas (b) y (c) donde es posible observar una serie de mínimos y máximos en la intensidad de las ondas de espín ligadas a la posición de los surcos y a la parte uniforme de la superficie de la película de YIG. Estos mínimos y máximos presentes en los periodos son consistentes con el orden de las correspondientes bandas prohibidas.



Figura 6. Distribución de intensidad temporal de las ondas de espín como función de la posición de la sonda para tres frecuencias. A) 4.010GHz (banda de transmisión), b) 4.075GHz (banda prohibida) y c) segunda banda prohibida. Para un pulso de 25ns.

Otro interesante resultado, claramente observado en la figura 5 y apenas distinguible en la figura 6, es el comportamiento de los pulsos de ondas de espín a frecuencias que coinciden con la frecuencia central de las primeras 2 bandas prohibidas. En este escenario, es evidente que el pulso es fuertemente afectado por la presencia del cristal magnónico, y, en posiciones de la sonda mayores a 2 mm, es claramente observable que sólo la parte frontal y la parte trasera de los pulsos son capaces de propagarse hasta el final de la ventana de medición. Este comportamiento es debido a la naturaleza de las ondas de espín usadas aquí. La forma en que los pulsos de ondas de espín son creados, encendiendo y apagando un diodo interruptor, introduce componentes de alta frecuencia tanto en el frente como en la parte trasera de los pulsos. Estas componentes de alta frecuencia no corresponden con las frecuencias de máxima acción de las bandas prohibidas lo que se traduce en un libre paso a través de la estructura sin mecanismos de amortiguamiento adicional. De esta forma, la parte frontal y trasera del pulso logra transmitirse libremente mientras que la parte central del pulso experimenta los mecanismos de amortiguamiento adicionales generados por la estructura. Es importante notar que aún cuando se esperaría ver una reflexión o acumulación de la energía de las ondas de espín en el cristal magnónico, nosotros fuimos incapaces de observar una señal reflejada de buena intensidad. Esto puede ser atribuido al efecto de no reciprocidad de las ondas de superficie el cual dicta que cualquier onda contra propagante tenga el máximo de su energía en la superficie opuesta de la película.

#### Conclusión

En este trabajo, nosotros mapeamos experimentalmente la evolución de los pulsos de ondas de espín en el dominio del tiempo y de la frecuencia en el interior de un cristal magnónico como función de la duración del pulso. Estos resultados muestran el defecto de la duración del pulso de excitación en el rendimiento del cristal magnónico como un dispositivo funcional sensitivo en frecuencia. En dispositivos de procesamiento de señales de alta velocidad, las tasas de transmisión requieren de pulsos cortos en el tiempo, lo que resulta en grandes anchos de banda. Nosotros encontramos que en un cristal magnónico, tales pulsos podrían no ser apropiadamente filtrados a menos de que el cristal magnónico se ha diseñado con bandas prohibidas de gran ancho de banda. Se demostró que una banda prohibida relativamente estrecha es incapaz de filtrar en su totalidad pulsos cortos rectangulares debido a las componentes de altas frecuencias contenidas tanto en sus flancos de subida como en los de bajada.

#### Referencia

- <sup>2</sup>A. B. Ustinov, N. Yu. Grigor'eva and B. A. Kalinikos, JETP Letters 88, 31, (2008)
- <sup>3</sup>A. V. Drozdovskii and B. A. Kalinikos, JETP Letters **95**, 357, (2012)
- <sup>4</sup>A. B. Ustinov, B. A. Kalinikos, V. E. Demidov, and S. O. Demokritov, Phys. Rev. B 81 180406(R) (2010)
- <sup>5</sup>A. B. Ustinov, A. V. Drozdovskii and B. A. Kalinikos, Appl. Phys. Lett. **96**, 142513, (2010)
- <sup>6</sup>A. V. Chumak, V. S. Tiberkevich, A. D. Karenowska, A. A. Serga, J. F. Gregg, A. N. Slavin and B. Hillebrands, Nature Communications **1**, 141 (2010)
- <sup>7</sup>A. D. Karenowska, A. V. Chumak, A. A. Serga, J. F. Gregg, and B. Hillebrands, Appl. Phys. Lett. 96, 082505 (2010)
- <sup>8</sup>Yu. V. Gulyaev and S. A. Nikitov Dokl. Phys. **46**, 687 (2001)
- <sup>9</sup>C. G. Sykes, J. D. Adam, and J. H. Collins, Appl. Phys. Lett. 29, 388 (1976)
- <sup>10</sup>J. P. Parekh and H. S. Tuan, Appl. Phys. Lett. **30**, 667 (1977)
- <sup>11</sup>J. P. Parekh and H. S. Tuan, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. 26, 1039 (1978)
- <sup>12</sup>J. Gouzerh, A. A. Stashkevish, N. G. Kovshikov, V.V. Matyushev and J. M. Desvignes. J. Magn. Magn. Mater. 101, 189 (1991)
- <sup>13</sup>P. A. Kolodin and B. Hillebrands, J. Magn. Mang. Mater. **161**, 199 (1996)
- <sup>14</sup>A. V. Chumak, T. Neumann, A. A. Serga, B. Hillebrands, and M. P. Kostylev, J. Phys. D: Appl. Phys. 42, 205005 (2009)
- <sup>15</sup>A. V. Chumak, A. A. Serga, B. Hillebrands, and M. P. Kostylev, Appl. Phys. Lett. 93, 022508 (2008)
- <sup>16</sup>A. V. Chumak, A. A. Serga, S. Wolff, B. Hillebrands, and M. P. Kostylev, Appl. Phys. Lett. **94**, 172511 (2009)
- <sup>17</sup>A. V. Chumak, A. A. Serga, S. Wolff, B. Hillebrands, and M. P. Kostylev, J. Appl. Phys. **105**, 083906 (2009)
- <sup>18</sup>F. Ciubotaru, A. V. Chumak, B. Obry, A. A. Serga, B. Hillebrands. Phys. Rev. B. 88, 134406 (2013)
- <sup>19</sup>A. V. Chumak, A. A. Serga, and B. Hillebrands, Nature Communications, **5**, 4700 (2014)
- <sup>20</sup>Y. Filimonov, E. Pavlov, S. Vystostkii, and S. Nikitov, Appl. Phys. Lett. 101, 242408 (2012)
- <sup>21</sup>Y. Zhu, K. H. Chi, and C. S. Tsai, Appl. Phys. Lett. 105, 022411 (2014)
- <sup>22</sup>P. J. Metaxas, M. Sushruth, R. A. Begley, J. Ding, R. C. Woodward, I. S. Maksymov, M. Albert, W. Wang,
- H. Fangohr, A. O. Adeyeye, and M. Kostylev, Appl. Phys. Lett. 106, 232406 (2015)
- <sup>23</sup>M. Krawczyk and D. Grundler, J. Phys.: Condens. Matter 26, 123202 (2014)
- <sup>24</sup>B. Lenk, H. Ulrichs, F. Garbs, and M. Münzenberg, Physics Reports **507**, 107 (2011)
- <sup>25</sup>V. V. Kruglyak, S. O. Demokritov, and D. Grundler, J. Phys. D: Appl. Phys. 43, 264001 (2010)
- <sup>26</sup>M. Vogel, A. V. Chumak, E. H. Waller, T. Langner, V. I. Vasyuchka, B. Hillebrands, and G. von Freymann, Nature Physics, 11, 487 (2015)
- <sup>27</sup>A. A Serga, A. V. Chumak, and B. Hillebrands, J. Phys. D: Appl. Phys. 43, 264002 (2010)
- <sup>28</sup>N. P. Vlannes, J. Appl. Phys. **61**(1), 416 (1987)
- <sup>29</sup>A. Maeda and M. Susaki, IEEE Trans Magn. 42, 3096 (2006)
- <sup>30</sup> D. D. Stancil and A. Prabhakar, Spin Waves: Theory and Applications (Springer, New York, 2009)
- <sup>31</sup>C. Kittel, Introduction to Solid State Physics (John Wiley and Sons, New York, 1996)
- <sup>32</sup>M. L. Sokolovskyy and M. Krawczyk, J. Nanopart. Res. 13, 6085 (2011)
- <sup>33</sup>Ki-Suk Lee, Dong-Soo Han, and Sang-Koog Kim, Phys. Rev. Lett. 102, 127202 (2009)
- <sup>34</sup>M. Kostylev, P. Schrader, R. L. Stamps, G. Gubbiotti, G. Carlotti, A. O. Adeyeye, S. Goolaup, and N. Singh, Appl. Phys. Lett. 92, 132504 (2008)
- <sup>35</sup>M. Mruczkiewicz, E. S. Pavlov, S. L. Vysotsky, M. Krawczyk, Yu. A. Filimonov, and S. A. Nikitov Phys. Rev. B 90, 174416 (2014)
- <sup>36</sup>Kazuaki Sakoda and Hitomi Shiroma, Phys. Rev. B. **56**, 4830 (1997)

# Patrones en la movilidad humana en zonas urbanas

Alejandro P. Riascos

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, 01000 Ciudad de México, México

Diversos aspectos de la movilidad humana en zonas urbanas pueden ser descritos estadísticamente con el fin de detectar patrones en el movimiento de las personas inducido por la complejidad en la distribución de lugares de interés y recursos en una ciudad. Por otra parte, en la física estadística se conocen los vuelos de Lévy asociados a la difusión en medios complejos. En este trabajo se presenta el análisis de datos con registros de usuarios en la red social Foursquare, el movimiento de bicicletas en Nueva York y Chicago y la actividad del servicio de taxis en Nueva York. Los resultados muestran que la movilidad humana en zonas urbanas a nivel global puede ser descrita con un modelamiento con vuelos de Lévy entre puntos de interés.

# 1. Introducción

El estudio de la naturaleza de sistemas complejos que surgen en diferentes contextos de la ciencia resulta en un desafío para la humanidad. Este tipo de sistemas aparecen a diferentes escalas y en campos tan variados como la biología con las grandes cantidades de información en el genoma, la economía en la que participan múltiples agentes que interactúan con reglas aparentemente básicas pero con consecuencias impredecibles, las redes sociales cuya manipulación puede definir el destino de un país en tiempos electorales, la propagación de epidemias que en un mundo altamente conectado pueden convertirse en una gran amenaza, así como la movilidad humana en zonas urbanas que demanda grandes recursos energéticos y tiempo para sus habitantes.

Estos son solo algunos ejemplos en los que métodos bien conocidos en la física pueden dar un aporte fundamental al entendimiento de las reglas básicas que influyen en la evolución temporal de estos sistemas. Diversos sistemas complejos pueden ser modelados por procesos dinámicos que tienen lugar en una red. Las redes describen estos sistemas asociando un nodo a cada una de sus partes y por medio de conexiones entre nodos se establece la forma en la que las partes del sistema interactúan. La estructura resultante tiene una riqueza extraordinaria y varios tipos de redes se han estudiado en las últimas décadas. Adicionalmente a esto, las redes o los fenómenos que tienen lugar en estas estructuras pueden variar en el tiempo, en este caso es de interés estudiar la relación entre la estructura de la red y la dinámica del proceso. Entre los procesos dinámicos en redes son de importancia la sincronización, los mecanismos de control en la red, las redes de transporte, la movilidad humana, la propagación de epidemias, el problema de búsqueda, el transporte de energía, entre otros.

En este trabajo se exponen algunos de los resultados recientes obtenidos a partir de datos de movilidad humana en ciudades y su modelamiento utilizando caminantes aleatorios en sistemas discretos. Este enfoque muestra como ideas de la física estadística pueden ser aplicadas para el entendimiento de sistemas complejos; en este caso, la movilidad de personas al interactuar con todos los recursos de un medio altamente complejo como lo son las ciudades.

### 2. Vuelos de Lévy

El término vuelos de Lévy hace referencia a un caminante aleatorio con desplazamientos l con una distribución de probabilidad  $\mathcal{K}(l)$  que asintóticamente se comporta como una ley de potencia inversa. Para los vuelos de Lévy en  $\mathbb{R}^n$ ,  $\mathcal{K}(0) = 0$  y si  $l \neq 0$  [1]

$$\mathcal{K}(l) \sim \frac{1}{|l|^{n+2\gamma}} \quad \text{con} \quad 0 < \gamma < 1,$$
(1)

donde  $|\ldots|$  representa la norma Euclidiana en  $\mathbb{R}^n$ . Bajo esta definición, la varianza  $\int \mathcal{K}(x)|x|^2 d^n x$  de los desplazamientos diverge. Esta característica diferencia notablemente a los vuelos de Lévy con el movimiento Browniano, para el que la varianza es finita [2]. Los vuelos de Lévy poseen un comportamiento fractal que consiste en formas que alternan entre las trayectorias descritas por movimientos locales (similares a lo observado en el movimiento Browniano) interrumpidas por eventuales desplazamientos de largo alcance que dan inicio a un nuevo grupo de desplazamientos locales; esta estructura se repite a todas las escalas. De esta manera los vuelos de Lévy combinan un movimiento local, que se realiza con mayor probabilidad, con una dinámica de desplazamientos de largo alcance que aparecen con baja probabilidad. Los vuelos de Lévy constituyen un campo activo de investigación en diferentes sistemas complejos. Por ejemplo, se han encontrado vuelos de Lévy en el contexto de la dinámica animal y el forrajeo [3], la movilidad humana [4], las búsquedas mentales y el comportamiento [5, 6], la dispersión en medios porosos [7], entre otros [8, 9].

### 3. Caminantes aleatorios en medios discretos

Los caminantes aleatorios en redes constituyen un tema fundamental en el estudio de diversos sistemas complejos ya en estas estructuras es posible analizar modelos que permitan entender fenómenos de transporte en campos tan variados como son el transporte en complejos fotosintéticos, la difusión en medios anisótropos, la movilidad humana, entre otros. Un caminante aleatorio en una red es descrito como un proceso sin memoria de los sitios visitados y definido por probabilidades de transición que pueden ser locales (de un nodo a uno de sus vecinos en la red) o no locales en los que es posible pasar en un solo paso a nodos más allá de los sitios vecinos.

De esta manera, un caminante aleatorio en una red es un proceso Markoviano descrito por una ecuación maestra con tiempo discreto t = 0, 1, 2, ... dada por [10]

$$P_{ij}(t+1) = \sum_{l=1}^{N} P_{il}(t) w_{l \to j} , \qquad (2)$$

donde  $P_{ij}(t)$  es la probabilidad de encontrar al caminante en el nodo j al tiempo t partiendo del nodo i en el instante t = 0. La cantidad  $w_{i \to j}$  es la probabilidad de pasar del nodo i al nodo j en un solo paso. Así,  $w_{i \to j}$  contiene la información de cómo el caminante aleatorio se mueve en la red y resulta conveniente definir la matriz de transición  $\mathbf{W}$  con elementos  $W_{ij} = w_{i \to j}$ .

Este caso define al caminante aleatorio más simple en el que en cada paso se desplaza del nodo en que se encuentra a uno de sus vecinos en la red. La probabilidad de pasar a cualquiera de estos vecinos es la misma; en consecuencia,  $w_{i\to j}$  está dada por [11]

$$w_{i \to j} = \frac{A_{ij}}{k_i}.\tag{3}$$

Este tipo de movimiento se empleó inicialmente en redes cuadradas regulares con el fin estudiar difusión [2, 12] y en redes complejas se define en [11]. En los últimos años se han estudiado en diversos artículos las consecuencias de esta dinámica para diferentes tipos de redes [13].

La dinámica definida por la ecuación maestra (2) es mucho más general y puede utilizarse para describir procesos en los que el caminante aleatorio visita sitios específicos en un plano. Por ejemplo, motivados por los vuelos de Lévy podemos definir un caminante aleatorio que sigue una estrategía similar para moverse visitando puntos específicos en el plano Euclidiano. De esta manera, se consideran  $\mathcal{N}$  puntos en este plano; además, se conocen las coordenadas de sus posiciones siendo  $l_{ab}$  la distancia Euclidiana entre los lugares a y b. Con esta información se puede definir un caminante aleatorio con probabilidades de transición entre dos sitios a y b [10, 14]

$$w_{a \to b}^{(\alpha)}(R) = \frac{\Omega_{ab}^{(\alpha)}(R)}{\sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \Omega_{am}^{(\alpha)}(R)},\tag{4}$$

donde

$$\Omega_{ab}^{(\alpha)}(R) = \begin{cases} 1 & \text{para} \quad 0 \le l_{ab} \le R, \\ (R/l_{ab})^{\alpha} & \text{para} \quad R < l_{ab}, \end{cases}$$
(5)

donde  $\alpha$  y R son parámetros reales positivos. El radio R determina una vecindad local a cada punto en el que el caminante puede ir con igual probabilidad desde un lugar a cualquier punto en esta zona independiente de las distancia que los separa. Por otra parte, para lugares separados por distancias mayores que R, la probabilidad de pasar de a a b decae de manera proporcional a  $l_{ab}^{-\alpha}$  tal como en los vuelos de Lévy. De esta manera, el parámetro R define una longitud característica del entorno local y  $\alpha$  controla la no localidad del caminante aleatorio.

En la Figura 1(a) se presenta la simulación Monte Carlo de las ecuaciones (4)-(5). Para ello, se generaron  $\mathcal{N} = 2000$  puntos en el plano en la región  $[0,1] \times [0,1]$ , se exploran los efectos del radio R = 0.01 y  $\alpha = 3$ . En la Figura 1(b) se presenta el análisis estadístico de las distancias l recorridas entre dos puntos para diferentes valores de  $\alpha$ . Los resultados muestran cómo en una primera parte  $P(l) \propto l^{-\alpha+1}$ , esta tendencia se ve alterada debido a que toda la dinámica se da en una región finita en la que la máxima distancia posible es  $\sqrt{2}$ .

#### 4. Análisis de datos de Foursquare en Nueva York y Tokio

En esta sección estudiamos la movilidad humana y el comportamiento colectivo de las personas que visitan lugares específicos en dos grandes ciudades. Utilizamos los datos de los registros de Foursquare explorados en [15] para el análisis de los patrones espacio-temporales de la actividad de los usuarios en las redes sociales basadas en la ubicación. El conjunto de datos contiene registros en la ciudad de Nueva York y Tokio, recopilados durante aproximadamente 10 meses (del 12 de abril de 2012 al 16 de febrero de 2013), para usuarios anónimos que visitan lugares como restaurantes, gimnasios, bares, universidades, entre otros. Contiene 227 428 registros en la ciudad de Nueva York y 573 703 registros en Tokio. El check-in de cada usuario está asociado con su marca de tiempo, las coordenadas GPS de latitud y longitud de la ubicación visitada y una breve descripción del lugar [15]. Para el caso de Nueva York, el conjunto de datos contiene las trayectorias de N = 1083 usuarios y N = 2293 usuarios en Tokio.

En la Figura 2, mostramos la distribución de probabilidad P(r) de la distancia r entre las ubicaciones informadas en dos registros sucesivos de los usuarios. Analizamos las entradas reportadas por todos



Figura 1: Análisis estadístico de desplazamientos generados a partir de (4). (a) Simulación Monte Carlo de un caminante aleatorio en tiempo discreto que visita  $\mathcal{N} = 2000$  ubicaciones específicas en la región  $[0, 1] \times [0, 1]$  en  $\mathbb{R}^2$  siguiendo la estrategia aleatoria dada por la ecuación (4) con  $\alpha = 3$  y R = 0.01. El número total de pasos es t = 200 y la escala en la barra de color representa el tiempo asociado a cada paso. (b) Probabilidad P(l) de encontrar un desplazamiento de longitud l, en función de l, para diferentes valores de  $\alpha$ . Analizamos los desplazamientos de 10<sup>6</sup> entre sitios de visitados por los caminantes aleatorios; el valor de R es el mismo que en (a). Las líneas discontinuas representan la relación de ley de potencias  $P(l) \propto l^{-\alpha+1}$ . Imagen tomada de [14].

los usuarios para observar globalmente la dinámica espacial en cada ciudad. En este caso, buscando el mejor ajuste de la forma  $P(r) \propto r^{-\delta}$  para desplazamientos de longitud r en el intervalo 0.001 Km  $\leq r \leq 10$  Km, obtenemos el valor  $\delta = 1.147$  para el conjunto de datos de Nueva York y  $\delta = 1.150$  para los desplazamientos registrados por los usuarios en Tokio. La distribución sigue una ley de potencia inversa cercana a  $P(r) \propto r^{-1}$  con una caída abrupta debido a los efectos de tamaño finito. Este resultado es similar a lo encontrado con el modelo en la Figura 1(b) para la simulación de Monte Carlo con  $\alpha = 2$ . Esto sugiere que los desplazamientos de personas en las grandes ciudades tienen una conexión con la estrategia Lévy en nuestro modelo.

## 5. Sistemas de bicicletas compartidas y taxis

Los resultados mostrados en la sección anterior sugieren que un modelamiento con vuelos de Lévy captura algunas de las características observadas en la movilidad en ciudades. Sin embargo, las personas tienen rutinas y un modelamiento de esta actividad requiere un formalismo que va más allá de los caminantes aleatorios descritos por las ecuaciones (4) y (5). Por otra parte, el movimiento de vehículos en sistemas de bicicletas compartidas y taxis nos pueden dar información de cómo las personas viajan entre dos sitios de interés.

Como un primer ejemplo, estudiamos la dinámica colectiva de vehículos en dos sistemas de bicicletas



Figura 2: Análisis estadístico de las distancias entre check-ins sucesivos de usuarios en Foursquare. Distribución de probabilidad P(r) asociada a la distancia r entre lugares visitados sucesivamente. La línea discontinua representa la relación de ley de potencia  $P(r) \propto r^{-1}$ . Imagen tomada de [14].

compartidas donde usuarios toman una bicicleta en una estación determinada y la entregan en otro punto definido de la ciudad. Analizamos los registros de usuarios anónimos en las ciudades de Chicago v Nueva York. Divvy es el sistema de bicicletas compartidas de Chicago, con 580 estaciones y 5800 bicicletas en servicio. En este sistema exploramos 9 992 991 registros de viajes desde junio de 2013 hasta diciembre de 2016, el conjunto de datos completo con los registros de viajes históricos está disponible para el público en [16]. Para el mismo período de tiempo, analizamos la actividad del sistema Citi Bike en Nueva York con 10000 bicicletas y 600 estaciones. Citi Bike es el sistema de bicicletas compartidas de la ciudad de Nueva York y el más grande de los Estados Unidos. El número de registros estudiados es de 36 228 361 y el conjunto de datos está disponible en la página web [17]. Estos dos sistemas están disponibles para su uso las 24 horas del día, los 7 días de la semana, los 365 días del año. Las bases de datos incluyen información anónima de cada viaje en bicicleta, incluido el día y la hora de inicio del viaje, el día y la hora de finalización del viaje, la duración del viaje, así como las coordenadas GPS (latitud y longitud) de las estaciones de inicio y finalización. Los conjuntos de datos de la actividad de los usuarios en estos dos sistemas brindan información para caracterizar la dinámica global definida por la ubicación de las estaciones y las transiciones entre ellas. Cabe mencionar que las bases de datos con registros de la actividad de los sistemas Divvy y Citi Bike son una fuente valiosa para el estudio de leyes fundamentales en la dinámica de sistemas de bicicletas compartidas.

A partir del análisis del movimiento de los vehículos se encontró que el mejor modelamiento de los datos se obtiene con la ecuación (4) y (5) con R aproximadamente 1 Km y con el parámetro  $\alpha = 2$ . En la Figura 3 se presenta el análisis estadístico de desplazamientos en sistemas de bicicletas compartidas. Los resultados muestran la densidad de probabilidad p(d) de la distancia geográfica d entre las



Figura 3: Análisis estadístico de desplazamientos en sistemas de bicicletas compartidas. Se grafica la densidad de probabilidad p(d) de la distancia geográfica d entre las estaciones inicial y final de los usuarios sistemas de bicicletas en las ciudades de (a) Chicago y (b) Nueva York. Presentamos estadísticas obtenidas del análisis de los conjuntos de datos completos y las transiciones aleatorias entre la estación de salida i y la ubicación final j. Los valores simulados se generan usando simulaciones Monte Carlo (MCS) con probabilidades de transición calculadas con información en la matriz de viajes entre estaciones y las probabilidades de transición  $\omega_{i\to j}^{(\alpha)}(R)$  definidas por el modelo en las ecuaciones (4) y (5). Se utilizan como guía líneas continuas presentadas con el análisis de los conjuntos de datos con registros reales de la movilidad. Imagen tomada de [18].

estaciones inicial y final de los usuarios de los sistemas en las ciudades de (a) Chicago y (b) Nueva York. Presentamos estadísticas obtenidas del análisis de los conjuntos de datos completos y las transiciones aleatorias entre la estación de partida i y la ubicación final j utilizando el modelo dado por las ecuaciones (4) y (5). Los valores simulados se generan mediante el uso de simulaciones Monte Carlo (MCS).

Por otra parte, en [19] exploramos los registros de viajes de taxi teniendo en cuenta los límites administrativos, incluidos los cinco distritos de la ciudad de Nueva York. Como resultado, para los siete años estudiados tenemos 1 148 052 357 viajes en taxi. Los resultados mostraron que un modelo de agentes aleatorios descritos definido por las probabilidades (4) y (5) con R = 1.8 Km y  $\alpha = 2$  capturan las características observadas en gran parte de los datos. En forma similar a lo presentado en la Figura 3, las simulaciones Monte Carlo nos muestran que el modelo es una buena aproximación a la actividad de los taxis con excepción de los viajes a dos lugares específicos de la ciudad que son los aeropuertos La Guardia y John F. Kennedy de Nueva York [19].

## 6. Comentarios finales

Todos los análisis presentados muestran que la movilidad humana entre sitios de interés en una ciudad tiene características similares a lo observado a los vuelos de Lévy con un parámetro  $\alpha$  cercano a 2. Las causas de esta dinámica tan particular no son conocidas pero pueden estar relacionadas con la distribución de recursos en las ciudades haciendo que sitios muy importantes generen la necesidad de desplazamientos de largo alcance que aparecen con menor frecuencia mientras que muchos de los viajes se dan a sitios cercanos; es decir, en un entorno local. El entendimiento de este tipo de comportamientos resulta de utilidad en la planificación de las ciudades y sus sistemas de transporte. Algo de mucha importancia cuando se quieren optimizar los recursos para hacer a las ciudades más sostenibles.

## Referencias

- T. M. Michelitsch, A. P. Riascos, B. A. Collet, A. F. Nowakowski, and F. C. G. A. Nicolleau, Fractional Dynamics on Networks and Lattices. London: ISTE/Wiley, 2019.
- [2] G. Weiss, Aspects and Applications of the Random Walk. Amsterdam: North Holland, 1994.
- [3] G. M. Viswanathan, M. G. E. da Luz, E. P. Raposo, and H. E. Stanley, *The Physics of Foraging*. New York: Cambridge University Press, 2011.
- [4] D. Brockmann, L. Hufnagel, and T. Geisel, "The scaling laws of human travel.," *Nature (London)*, vol. 439, no. 7075, pp. 462–465, 2006.
- [5] F. Radicchi, A. Baronchelli, and L. A. N. Amaral, "Rationality, irrationality and escalating behavior in lowest unique bid auctions," *PLoS ONE*, vol. 7, p. e29910, 01 2012.
- [6] F. Radicchi and A. Baronchelli, "Evolution of optimal Lévy-flight strategies in human mental searches," *Phys. Rev.* E, vol. 85, p. 061121, Jun 2012.
- [7] P. Barthelemy, J. Bertolotti, and D. Wiersma, "A Lévy flight for light," Nature, vol. 453, pp. 495–498, 2008.
- [8] R. Metzler and J. Klafter, "The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics," J. Phys. A: Math. Gen., vol. 37, no. 31, p. R161, 2004.
- R. Metzler and J. Klafter, "The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach," *Phys. Rep.*, vol. 339, no. 1, pp. 1–77, 2000.
- [10] A. P. Riascos and J. L. Mateos, "Random walks on weighted networks: A survey of local and non-local dynamics," *Journal of Complex Networks*, vol. 9, p. cnab032, 2021.
- [11] J. D. Noh and H. Rieger, "Random walks on complex networks," Phys. Rev. Lett., vol. 92, p. 118701, Mar 2004.
- [12] B. D. Hughes, Random Walks and Random Environments: Vol. 1: Random Walks. Oxford University Press, USA, 1996.
- [13] N. Masuda, M. A. Porter, and R. Lambiotte, "Random walks and diffusion on networks," Phys. Rep., vol. 716–717, pp. 1–58, 2017.
- [14] A. P. Riascos and J. L. Mateos, "Emergence of encounter networks due to human mobility," PLoS One, vol. 12, p. e0184532, 10 2017.
- [15] D. Yang, D. Zhang, V. Zheng, and Z. Yu, "Modeling user activity preference by leveraging user spatial temporal characteristics in lbsns," *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics: Systems*, vol. 45, pp. 129–142, Jan 2015.
- [16] "Divvy data: Historical trip data available to the public." https://www.divvybikes.com/system-data.
- [17] "Citi bike: System data." https://www.citibikenyc.com/system-data.
- [18] D. Loaiza-Monsalve and A. P. Riascos, "Human mobility in bike-sharing systems: Structure of local and non-local dynamics," *PLoS ONE*, vol. 14, p. e0213106, 03 2019.
- [19] A. P. Riascos and J. L. Mateos, "Networks and long-range mobility in cities: A study of more than one billion taxi trips in New York City," *Scientific Reports*, vol. 10, no. 1, p. 4022, 2020.

# EL FENÓMENO DE DESCARGA DE CORONA

F. Castillo, E. Vázquez-Vélez, B. Campillo, O. Flores, H. Martínez,

Grupo de Espectroscopia FAMOE Instituto de Ciencias Físicas, UNAM

Antes de poder explicar la descarga de corona, se deben introducir algunos conceptos básicos como el plasma y el fenómeno de ionización. Este trabajo es una descripción breve y mayoritariamente cualitativa de estos temas.

Hay cinco estados de la materia:

- 1. Sólido
- 2. Líquido
- 3. Gas
- 4. Plasma
- 5. Condensado de Bose Einstein

Los tres primeros son bien conocidos. El último, BEC [1,2], es un estado de la materia predicho por Albert Einstein utilizando formulaciones matemáticas desarrolladas por Satyendra Nath Bose, a principios de la década de 1920. Ocurre cuando los átomos, enfriados a una fracción de grado por encima del cero absoluto, se fusionan para formar un "superátomo" que se comporta como una entidad. BEC fue creado en un laboratorio de la Universidad de Colorado en Boulder por un equipo encabezado por Carl E. Wieman de UC-Boulder y Eric A. Cornell del Instituto Nacional de Estándares y Tecnología en 1995. Ganaron el Premio Nobel de Física en 2001 por este logro.

El plasma es una mezcla gaseosa de electrones y iones libres que tienen una energía cinética media alta. Los portadores de carga se influyen entre sí debido a sus cargas y energías inherentes, y también están influenciados por campos externos. Las propiedades físicas de los plasmas son notablemente diferentes de las de otros fluidos que han sido clasificados como el cuarto estado de la materia.

El término 'plasma' para gas ionizado fue introducido en 1927 por Irving Langmuir [3, 4], el premio Nobel de Química de 1932, porque la forma en que los electrones, iones y partículas de alta velocidad fluyen en el medio le recordó la forma en que se transporta el plasma sanguíneo. corpúsculos y otras materias. Langmuir también inventó las sondas eléctricas que llevan su nombre y que se utilizan para medir las propiedades del plasma, como la densidad

del portador de carga y la temperatura. Las sondas de Langmuir se examinarán más adelante. Desde la década de 1920, la ciencia del plasma se ha desarrollado rápidamente y se ha convertido en un campo propio. En la industria actual, el plasma se utiliza en una variedad de servicios, algunos de los cuales son para la fabricación de semiconductores y productos médicos, en iluminación y láseres, tecnología de soldadura y también en sistemas de propulsión espacial basados en plasma. La aplicación potencial para la generación de plasma en este estudio es en los motores de combustión supersónicos del futuro.

Aproximadamente el 99% del universo está en estado de plasma. La materia solar y estelar es plasma. Estos se clasifican como plasmas de alta temperatura. Otros ejemplos de HTP serían el plasma caliente creado en reacciones de fusión y fisión nuclear. En la Tierra, el plasma se encuentra en la ionosfera, que se puede agrupar junto con la aurora boreal o la aurora boreal como plasma de baja temperatura. El plasma también se encuentra en la atmósfera en forma de relámpago. Las densidades del plasma en el núcleo del sol y las estrellas son muy elevadas, siendo de 10 aproximadamente 10<sup>30</sup> partículas cm<sup>-3</sup> a una temperatura de unos 15 millones de Kelvin. En la corona solar, la densidad del plasma es del orden de 10<sup>8</sup> cm<sup>-3</sup> a temperaturas de aproximadamente 10<sup>6</sup> K. En incendios y llamas, la densidad del plasma está aproximadamente al mismo nivel, pero el plasma está a una temperatura mucho más baja. Los arcos y los relámpagos producen plasma de densidades en la región de 10<sup>18</sup> partículas cm<sup>-3</sup> con temperaturas en los miles de Kelvin. Las luces fluorescentes y de neón producen luz excitando plasma de baja presión en recipientes de vidrio con densidades de aproximadamente 10<sup>5</sup> partículas cm<sup>-3</sup> ya temperaturas de unos pocos cientos de grados Celsius [5].

Por otro lado, el plasma que se está generando en este estudio es de muy baja densidad, del orden de  $10^6$  cm<sup>-3</sup> a bajas temperaturas en la región de 300 K y puede denominarse gas débilmente ionizado.

## 1. Propiedades del plasma

Un plasma es un gas parcial o totalmente ionizado constituido básicamente por electrones e iones y, en el primer caso, también por especies neutras. En una descripción más detallada se deben añadir especies atómicas y moleculares excitadas, fotones y radicales libres, que son especies neutras altamente reactivas. Los plasmas se dividen en térmicos, si la energía de los electrones es igual a la de los iones, y en no térmicos o plasmas fríos si la energía de los electrones es superior a la de los iones, los cuales se encuentran a una temperatura próxima a la del ambiente. En la Figura 1 se presentan valores típicos de estas energías.

$$\frac{\textbf{TÉRMICO}}{\textbf{NO TÉRMICO}} \begin{cases} T_i \approx T_e \approx 2 \cdot 10^4 \text{ K} \\ \\ T_i \ll T_e \leq 10^5 \text{ K} \ (\approx 10 \text{ eV}) \\ \\ T_i \approx T \approx 300 \dots \ 10^3 \text{ K} \end{cases}$$

Figura 1. Clasificación de un plasma de acuerdo con la energía de electrones  $(T_e)$  e iones  $(T_i)$  [6].

El plasma se genera y se mantiene a través del suministro de energía eléctrica. Entre las distintas fuentes de energía eléctrica podemos encontrar dispositivos de corriente continua (DC) o de corriente alterna (AC) trabajando a la frecuencia de red (~50 Hz), baja frecuencia (< 50 kHz), radio frecuencia (RF) (~13.56 kHz) y microondas (~2.45 GHz). Por otra parte, hay una gran variedad de tipos de plasma atendiendo al rango de presiones (10-1...106 Pa), el tipo de gas y las condiciones de contorno de los electrodos y las paredes que confinan el plasma. Entre los más conocidos se encuentran las descargas homogéneas, los arcos, los *sparks*, las descargas corona y de barrera dieléctrica, las de radio frecuencia o las de microondas (ver Figura 2).



Figura 2. Visión general de los distintos tipos de plasmas [7].

En la Figura 3 se muestra la clasificación de plasmas según temperatura de electrones (Te) y temperatura de partículas mayores ( $T_g$ ).



Figura 3 Variación de temperatura-presión y los tipos de plasmas [8].

Los plasmas neutros contienen un número igual de portadores de carga positiva y negativa, de modo que la carga neta es cero. Como resultado de los portadores de carga, el plasma es un fluido conductor [9].

La propiedad más significativa del plasma es que está fuertemente influenciado por campos eléctricos y magnéticos. El efecto del campo eléctrico sobre una carga está descrito por la ley de Coulomb.

$$F_E = q E \tag{1}$$

donde  $F_E$  es la fuerza de Coulomb ejercida sobre la partícula de carga q en Coulombs y E es el campo eléctrico en V / m. La fuerza ejercida sobre la carga es independiente de su velocidad.

El efecto del campo magnético sobre una carga se expresa en la ley de Lorentz, que se da como:

$$F_B = q v \mathbf{x} B \tag{2}$$

donde  $F_B$  es la fuerza de Lorentz en N, ejercida sobre una partícula cargada en movimiento, q es la carga de la partícula en C, v es la velocidad de la partícula en m/s y B es el campo magnético en T. La dirección de esta fuerza puede ser determinada por la regla de la mano derecha; el pulgar muestra la dirección de la velocidad, el dedo índice, el campo magnético y el dedo medio, la fuerza. Según la ley de Lorentz, con la velocidad hay un aumento lineal en la fuerza ejercida sobre la partícula cargada. Por lo tanto, a altas velocidades, la magnetohidrodinámica es una opción viable para la actuación del flujo.

Cada portador de carga en el plasma aplica simultáneamente fuerzas de Coulombs entre sí. Esto da como resultado fuertes interacciones de fuerza y la formación de vainas dentro del fluido. Estas propiedades del plasma explican por qué el plasma es importante para la electromagneto hidrodinámica [10].

## 2. Ionización del aire

- A continuación, se mencionan algunos métodos de ionización de aire o gas [11]
- 1. Ionización por impacto de partículas
- 2. Ionización térmica
- 3. Emisión nuclear
- 4. Ionización por foto o irradiación
- 5. Ionización de campo eléctrico:
- (a) Ionización por descarga de arco
- (b) Ionización por descarga de corona

#### 2.1 Ionización por impacto de partículas

Cuando un átomo es golpeado por una partícula, como un electrón o un ión, puede perder o ganar carga dependiendo de la cantidad de energía transferida en el impacto. Esta energía tiene que exceder la energía de ionización  $E_i$  expresada en eV, donde e (1.6 x 10<sup>-19</sup> Culombios) es el valor absoluto de la carga de un electrón. En el caso de impactos de electrones, el electrón puede ser absorbido por el átomo o puede hacer que el átomo pierda electrones o simplemente excite los electrones de valencia del átomo. Se requiere una fuente de electrones para generar suficientes electrones para ionizar el gas y sostener los electrones para que duren lo suficiente como para causar ionización y los electrones deben acelerarse por medio de un campo eléctrico o magnético. Los electrones liberados en el proceso de ionización pueden producir ionización secundaria si sus energías son lo suficientemente altas.

En lugar de los electrones, los iones pueden acelerarse y hacer chocar y ionizar los átomos. Los iones son partículas más pesadas y, por lo tanto, requieren mucho más esfuerzo para acelerar y alcanzar la energía de ionización requerida. Esto se puede hacer en un acelerador de partículas o mediante fuertes campos eléctricos o magnéticos. Las reacciones nucleares emiten iones que tienen altas energías que pueden usarse en la ionización de gases. Sin embargo, este no es un enfoque seguro para un estudio de ionización para flujos supersónicos.

## 2.2 Ionización térmica

Toda la materia por encima de 10.000 K existe en estado de plasma. Y el fuego está lleno de iones y radicales libres. Si un gas se calienta a temperaturas adecuadamente altas, las energías de los componentes del gas se vuelven lo suficientemente altas como para inducir la ionización dentro del medio. El requisito de temperaturas tan altas y el problema de los contaminantes en el aire hacen que este sea un enfoque poco práctico para este estudio.

## 2.3 Emisión nuclear

Las reacciones de fusión que involucran hidrógeno emiten iones  $H^+$  y  $He^+$  con energías muy altas del orden de *MeV*. Las reacciones de fisión de átomos más pesados liberan iones de alta energía que pueden causar ionización secundaria. Sin embargo, este método de ionización no sería factible para un estudio de laboratorio a pequeña escala. No se pueden adaptar de forma segura para su aplicación en un túnel de choque.

## 2.4 Ionización por foto o irradiativa

Un átomo ionizable puede ser ionizado por el impacto de un fotón si la energía del fotón hv excede la energía de ionización del átomo. Se prefieren los rayos ultravioletas, los rayos X y los rayos gamma para la fotoionización. Sin embargo, si la energía de los fotones es mucho mayor que la energía de ionización umbral, la probabilidad de ionización disminuye. El grado de ionización también es menor para este método. Debido a este hecho y también a la dificultad de adaptar esta técnica para trabajar en un túnel de choque, no es viable para la ionización del aire supersónico.

## 2.5 Ionización de campo eléctrico

Este método implica pasar el gas entre electrodos ionizados. Cuando los átomos o moléculas entran en contacto con la superficie de los electrodos metálicos, pierden o ganan una carga sujeta a la polaridad del electrodo. Sin embargo, la densidad del campo eléctrico tiene que ser tan alta como unos pocos kV / m para iniciar la ionización. La geometría de los electrodos también es importante, ya que los campos eléctricos alrededor de objetos afilados y superficies metálicas con radios de curvatura bajos son más fuertes que alrededor de cuerpos

romos. A medida que aumenta la intensidad del campo eléctrico, las partículas que se acercan al electrodo se ionizan antes de alcanzarlo. La tasa de ionización disminuye a medida que disminuye la intensidad del campo eléctrico. Se cree que, a presiones y velocidades de aire más altas, se requerirán intensidades de campo eléctrico más altas. Se prefiere la ionización de campo eléctrico porque es fácil de generar y controlar campos eléctricos elevados en el laboratorio. Las geometrías de los electrodos se pueden variar y fabricar según se desee.

Cuando la intensidad del campo eléctrico aumenta más allá del potencial de ruptura del gas, se produce una descarga de arco. Esto se caracteriza por un fuerte flujo de corriente a través del gas entre los electrodos y una alta disipación de energía en forma de calor seguida inmediatamente por un fuerte sonido explosivo. Aunque este método puede producir una alta concentración de iones y cargas más altas de los iones (2+, 3+, 4+ o cargas más altas), no se ve favorecido debido a daños en el electrodo y el aparato, calentamiento del electrodo, inestabilidad de los arcos y la disipación de alta energía. La descarga de corona es, por otro lado, una descarga de baja energía que produce una ionización de menor densidad a costa de unos pocos *mW* de potencia. Es por esta razón de bajo consumo de energía que se ha adoptado este método de ionización para este estudio.

## 3. Descarga Corona

Corona se deriva de la palabra francesa para corona. Corona ha sido conocida durante siglos por la humanidad, y a menudo se le atribuyen propiedades sobrenaturales. En Europa, se conocía como el fuego de San Telmo, llamado así por San Erasmo, el santo patrón de los marineros porque a menudo los marineros lo veían como una llama de color blanco azulado en la parte superior de los mástiles y velas de los barcos, a menudo después de una tormenta, y así fue visto como una buena señal de los dioses. Según se informa, fue visto por muchos marineros a lo largo de la historia, incluidos Julio César, Magallanes, Colón y Charles Darwin, en su viaje a bordo del H.M.S. Beagle. William Shakespeare incluso lo mencionó en su obra "La tempestad". La corona también se ve en las puntas de las alas, las hélices y las antenas de los aviones. La descarga de corona se ve como un tenue resplandor alrededor de los conductores de alto voltaje, especialmente en las líneas de transmisión alrededor de hilos rotos.

La descarga de corona se utiliza en purificadores de aire para limpiar el aire ionizando el aire. El ozono es un subproducto de la descarga de corona y se usa para matar microbios y neutralizar contaminantes en el aire. La descarga de corona en las líneas de transmisión causa pérdida de energía y daño a los conductores y degrada los aisladores. Por lo tanto, las compañías eléctricas gastan grandes sumas de dinero para detectar descargas de corona en las líneas de transmisión y prevenirlas. Se sabe que la descarga de corona en las líneas de transmisión causa ruido de radiofrecuencia que interfiere con las señales de comunicación. Las antenas de alta frecuencia a menudo están equipadas con una bola en la parte superior para evitar terminar en una punta afilada que es propensa a la descarga de corona.

#### 3.1 Características de la descarga de corona

Corona [12] se observa en muchas formas, incluyendo brillos y halos, manchas, pinceles y serpentinas. El potencial en el que se encuentra que se origina la corona se denomina voltaje umbral de corona. Por encima de este voltaje, hay una región limitada, en la que la corriente aumenta proporcionalmente con el voltaje. Esto se llama régimen de la ley de Ohm. Después de esta región, la corriente aumenta más rápidamente, lo que lleva a la ruptura completa y a la formación de arcos o chispas en un punto llamado potencial de ruptura. La descarga de corona depende en gran medida de la geometría. La intensidad del campo eléctrico es mayor alrededor de la superficie de un conductor cargado con mayor curvatura o menor radio de curvatura. Si Q es la carga total almacenada en un conductor y r es su radio de curvatura, la intensidad del campo eléctrico E es inversamente proporcional al radio, como lo indica la siguiente ecuación, donde  $\varepsilon_0$  es la permitividad del espacio libre (aire) y es igual a 8.852 x  $10^{-12}$  F / m.

$$E = Q / (4\pi \varepsilon_0 r) \tag{3}$$

Por lo tanto, a medida que *r* disminuye, aumenta la intensidad del campo eléctrico. Esta es la razón por la que los pararrayos se hacen más afilados y las antenas deben protegerse de la descarga de corona.

Cuando la intensidad del campo eléctrico aumenta, afecta a los electrones en los orbitales atómicos y puede hacer que los átomos o moléculas polaricen o liberen electrones. El campo eléctrico máximo que un material dieléctrico puede soportar sin conducción se conoce como rigidez dieléctrica de ese material y se expresa en V/m, a menudo, en V/mm. Cuando el campo eléctrico aumenta más allá de la rigidez dieléctrica, el material se vuelve conductor mediante un proceso llamado efecto de avalancha, mediante el cual los electrones chocan con la estructura atómica o molecular, liberando más electrones que a su vez conducen a una mayor descomposición del material. Es posible que haya grandes corrientes en caso de avería. La rigidez dieléctrica del aire a temperatura y presión normales es de 3 kV/mm. En este punto, el aire se ioniza rápidamente y se forman arcos eléctricos. Esto es lo que sucede durante un rayo. La descarga de corona ocurre por debajo del potencial de ruptura, donde los electrones se excitan y liberan electroluminiscencia. Por tanto, no hay destrucción masiva del material.

Un electrón que es excitado por un campo eléctrico E ionizará un átomo o molécula de un gas si tiene suficiente energía, llamado potencial ionizante del gas particular, expresado en eV. Esto se muestra a continuación.

$$A + e \to A^+ + 2e \tag{4}$$

Por tanto, se libera un electrón extra en este proceso. Sin embargo, si el electrón no tiene suficiente energía, puede impartir cierta cantidad de energía cinética a la partícula con la que choca:

$$A + e + KE \to A^* + e \tag{5}$$

Esta energía cinética ganada por el átomo se libera como fotones que tienen una cierta energía y longitud de onda, lo que da como resultado el brillo asociado con las descargas de corona. Si la energía del fotón está por debajo de la del potencial ionizante, es absorbida por otros átomos y puede volver a liberarse. Si la energía del fotón excede el potencial de ionización, el átomo golpeado por el fotón puede liberar uno o más electrones dependiendo del nivel de energía. Esto puede resultar en una reacción en cadena, donde se inicia la ionización en el gas.

El aire está compuesto de nitrógeno (78%), oxígeno (21%), argón (0.93%), dióxido de carbono (0.03%), vapor de agua y partículas como polvo, polen, etc. Uno de los principales productos de la corona es el ozono. Los iones de oxígeno son del tipo  $O^+$ ,  $O_2^+$ ,  $O^-$ ,  $O^{2-}$  y  $O_3^-$ . Estos se combinan para producir ozono. El nitrógeno molecular también se disocia para formar óxidos de nitrógeno que son inestables y provocan una reacción con el oxígeno para crear más ozono. Las moléculas de agua producen iones de los tipos OH, H y O de cargas negativas y positivas. El contenido de humedad en el aire aumenta su conductividad y tiende a causar descomposición en un menor potencial. Esto se observa durante tormentas eléctricas que provocan frecuentes relámpagos. El aire ionizado también contiene electrones libres. Sin embargo, los electrones que son más ligeros tienen una vida útil más corta y son absorbidos por partículas más pesadas, lo que puede provocar la liberación de más electrones.

Se encuentra que las partículas de polvo aumentan las tasas de ionización. Esto ha sido observado en un fenómeno llamado efecto Malter.

Cuando la descarga de corona se induce a través de dos electrodos similares, se denomina corona bipolar. Si uno de los electrodos tiene una forma ventajosa para la descarga de corona, es decir, con un radio de curvatura menor en comparación con el otro, se forma una corona unipolar, ya que la descarga de corona se concentraría casi por completo alrededor del electrodo con mayor curvatura, que se denomina electrodo activo. Si el electrodo activo se hace positivo con respecto al electrodo pasivo, se produce una descarga de corona positiva. Y si el electrodo activo se convierte en cátodo, se genera una corona negativa.

La corona puede ser generada por un alto voltaje de DC o AC, en cuyo caso puede ser sinusoidal o pulsada. Las bobinas de Tesla, que generan efectos de descarga de corona dramáticos, operan a altas frecuencias de aproximadamente 300 kHz. Se ha descubierto que la corona es más intensa a frecuencias más altas. La energía pulsada se prefiere especialmente para aplicaciones industriales. En el caso de descargas de energía pulsadas, el ciclo de trabajo de la forma de onda se puede modificar para alterar el consumo de energía o la tasa de ionización. Además, la compensación de DC se puede cambiar para variar los efectos.

### 3.2 Corona vs. arcos y chispas

La corona se produce a intensidades de campo eléctrico elevadas, pero inferiores a la rigidez dieléctrica del medio. Por lo tanto, es una descarga de baja corriente y baja potencia con una fotoemisión de baja intensidad. Los arcos y las chispas se producen cuando se han cruzado las rigideces dieléctricas. Por lo tanto, esencialmente acortan el voltaje, creando una descarga de alta corriente y alta potencia, con alto calor y luminiscencia.

La descarga de corona se mantiene durante un período de tiempo más largo, siempre que se aplique el campo eléctrico. Los arcos y las chispas se extinguen rápidamente, ya que la energía almacenada en la fuente del campo eléctrico es disipada por la descarga.

El calentamiento causado por la corona no es tan significativo como el de los arcos y las chispas, aunque es motivo de preocupación para las compañías eléctricas, donde millas y millas de líneas de transmisión pueden crear una pérdida significativa por descarga de corona durante un largo período de tiempo. La descarga de corona disipa unos pocos W de potencia, pero generalmente muy por debajo de eso, en la región de mW o menos. Sin embargo, los arcos pueden consumir cientos, miles o más W de potencia en una fracción de segundo.

Corona es débilmente visible en las longitudes de onda visibles más cortas, en el rango azul y violeta, pero la mayor parte es UV. El calentamiento puede ser observado por cámaras infrarrojas. Los arcos y las chispas son en su mayoría visibles y liberan ondas en el espectro ultravioleta a través del infrarrojo.

## 3.3 Trabajos anteriores relacionados con la descarga de corona

Se han realizado muchos estudios relacionados con la descarga de corona tanto en campos aeroespaciales como en otros que podrían ser dignos de mención para el presente estudio. Estos se describen brevemente a continuación.

Anikin y col. [13], realizó estudios experimentales y numéricos para crear plasma mediante la aplicación de alto voltaje pulsado en aire atmosférico (1 atm) y de baja presión (0,1 a 30 Torr). El montaje fue un electrodo positivo en forma de cono, cuya distancia del electrodo pasivo, un disco plano se podía variar de 0 a 30 cm. La corona se detectó por medios ópticos. A una presión de 1 atm, el pulso tenía la forma de un pico de aumento rápido de 75 ns de duración y una frecuencia de 1,2 kHz. La amplitud máxima fue de 9 kV. Anikin y col. observaron serpentinas que aumentaron en intensidad con el voltaje. Para aire a baja presión se aplicaron pulsos de voltaje de 10 a 15 kV, con una duración de 25 ns, para lo cual se observó generación de iones y electrones de alta velocidad. Otra observación importante que se hizo fue que a medida que aumenta la presión, los campos eléctricos deben incrementarse para generar una corona. El mismo equipo de investigación ha aplicado esta técnica de ondas de ionización rápida de alta frecuencia en la ignición de mezclas de aire y combustible de hidrógeno e hidrocarburos [14].

Shale et al., [15] estudiaron las características de la corona positiva a varias presiones (0 a 80 psig) y temperaturas (600 a 1500 ° F). Estudiaron el comportamiento del voltaje frente a la presión y las temperaturas desde el inicio de la corona hasta la formación de arco. Se encontró que la corona positiva demostró un voltaje de arco superior más alto, dando así un rango más amplio de operabilidad para corona positiva sobre corona negativa. Además, para corona positiva a densidades más altas, el flujo de corriente disminuyó para un voltaje constante.

En la Universidad del Sur de California se han realizado varios trabajos interesantes que aplican la corona a la combustión de motores de automóviles y al tratamiento de gases de escape diésel. Concluyó que la corona tiene ciertas ventajas distintas sobre la combustión por arco, incluido un mejor acoplamiento de la energía con el gas, menores pérdidas por radiación y menores pérdidas debido a las perturbaciones dinámicas del gas. El trabajo en el tratamiento de los gases de escape diésel también ha arrojado resultados positivos.

Vinogradov y col. [16], han estudiado el efecto de la descarga de corona unipolar en una llama. Descubrieron que la altura de la llama disminuía al aumentar la intensidad del campo, con un apagado total de la llama a ciertas intensidades de campo altas. Chernikov y col. [17], han realizado investigaciones experimentales para estudiar el efecto de las descargas corona en mezclas supersónicas de aire y propano. Encontraron que no hubo una mejora significativa en la formación de radicales de OH, CH, O y  $H_2$  en el flujo debido a la descarga; sin embargo, hubo un aumento en la densidad de electrones en el flujo.

# 4. Técnicas de diagnóstico

A continuación se presentan las diferentes técnicas de diagnóstico a utilizar en general, que comprenden espectrometría de masas, espectroscopía de emisión óptica y la caracterización eléctrica del reactor.

## a) Espectrometría de masas

Los productos de las reacciones se analizan cuantitativamente por medio de un espectrómetro de masas (Sensorlab, Prisma Plus – Pfeiffer Vacuum) de tipo cuadrupolo simple conectado a la salida del reactor. El equipo consiste en una cámara de ionización de las especies a analizar y de un cuadrupolo constituido por cuatro varillas metálicas sometidas a tensión alterna de alta frecuencia. Este cuadrupolo crea un campo eléctrico oscilante que actúa como filtro de masas, permitiendo pasar iones de un determinado cociente masa/carga. Existe un modo de medida de barrido, en el que se escanean secuencialmente todos los valores masa/carga comprendidos en un intervalo dado. También existe la posibilidad de monitorizar una determinada razón masa/carga a lo largo del tiempo.

Con el fin de hacer esta cuantificación correctamente, el espectrómetro ha sido calibrado con mezclas conocidas de los gases implicados en los experimentos llevados a cabo.

#### b) Espectroscopía de emisión óptica

En la sección dedicada a la producción de amoniaco se realizan medidas de espectroscopía de emisión óptica (OES) a través de un pasamuros de fibra óptica situado en la pared lateral del reactor. La punta de la fibra se coloca lo más cerca posible de la región de plasma, y la radiación se recoge utilizando un colimador. Los espectros se miden por medio de un monocromador HORIBA Jobin Yvon modelo FHR640 que utiliza una red de difracción centrada en 330 nm, con una contante de red de 1200 líneas mm<sup>-1</sup>. Las rendijas de entrada y salida tienen una anchura de 300 µm, el tiempo de integración es de 1 s y la resolución a 0.2 nm.

#### c. Sondas de detección de iones

El plasma es un gas conductor compuesto por partículas cargadas, iones y electrones. El plasma neutro tiene el mismo número de partículas cargadas negativas y positivas. Para la mayoría de las aplicaciones que involucran plasma de baja temperatura y baja energía cinética, se adopta la distribución de partículas de Maxwell [18]. La distribución de Maxwell se basa en las velocidades de las partículas. La energía cinética media de una partícula en el espacio 3D se muestra como

$$\frac{1}{2}(Mv^2) = \frac{1}{2}(3T)$$
 (6)

donde M es la masa promedio de las partículas, v es la velocidad promedio y T es la temperatura. El número de partículas que tienen velocidad v, n(v), de la población total de partículas de plasma N, viene dado por la siguiente ecuación.

$$n(v) = N \{M/2\pi\}^{3/2} e^{(Mv2/2T)}$$
(7)

Cuando el plasma entra en contacto con una superficie, los portadores de carga golpean la pared y pierden su carga. Los electrones, que tienen más energía cinética, son absorbidos por la pared más rápido. Por tanto, se forma una región de plasma neto con carga positiva alrededor de la superficie. A esto se le llama funda. Las vainas se forman alrededor de naves espaciales y satélites a medida que avanzan en la exosfera de la Tierra. También se forman vainas en la superficie de las sondas que se introducen en el plasma para medir sus propiedades.

Las partículas cargadas dentro del plasma ejercen fuerzas electrostáticas (Coulombic) entre sí. Considere un electrón dentro de un plasma. Las partículas positivas son atraídas por este electrón y se acercan a él, mientras que las partículas negativas son repelidas por el electrón y se alejan de él. La distancia máxima dentro del plasma a la que se siente el efecto de este electrón se denomina longitud de Debye o longitud de tramado de Debye. Lleva el nombre

de Peter J. W. Debye (1884-1966), un físico estadounidense nacido en Holanda y ganador del Premio Nobel de Física en 1936.

La región alrededor del electrón con radio igual a su longitud de Debye forma una esfera de Debye. Si una carga está presente en el vacío, su efecto se siente teóricamente hasta el infinito. Sin embargo, para un plasma, hay una gran cantidad de partículas cargadas en las proximidades y, por lo tanto, el efecto de la carga puede despreciarse fuera de la Longitud Debye.

Las longitudes de Debye  $\lambda_D$  [19] para los electrones se expresan mediante la siguiente ecuación donde k es la constante de Boltzmann, e es la carga del electrón,  $n_e$  es la concentración de los electrones y  $T_e$  es la temperatura del electrón.

$$\lambda_D = (k T_e) / (4\pi e^2 n_e) \tag{8}$$

Los campos eléctricos aplicados a un plasma pueden penetrar sólo en el orden de la longitud Debye del plasma, i. e. múltiplos de la longitud de Debye, y este espesor de la vaina es proporcional a la fuerza del campo eléctrico aplicado. Estos conceptos son importantes para la comprensión de las sondas de Langmuir.

## d Sondas Langmuir

Irving Langmuir introdujo sondas eléctricas insertadas en el plasma para estudiar sus propiedades en la década de 1920. Estas sondas se utilizan para medir las propiedades del plasma, como la densidad de iones y la temperatura de los iones, que se obtienen a partir de las características de la sonda, obtenidas midiendo la corriente y el voltaje de polarización de la sonda. Se utilizan dos tipos de sondas Langmuir: la sonda simple y la sonda doble, como se muestra en la Figura 4. Sus operaciones son similares.





Figura 4: Sondas de Langmuir, tipos simple (arriba) y doble (abajo).

Las sondas de Langmuir [20, 21] están formadas por conductores esféricos, cilíndricos o de placa plana que se sumergen en el plasma. El flujo de corriente debido a las cargas recogidas y la tensión de polarización aplicada a la sonda se miden mediante circuitos apropiados.

La suposición general hecha para estudiar las características de la sonda de Langmuir es que el plasma está compuesto de iones y electrones positivos, i. e., no hay partículas cargadas negativamente, excepto electrones. Cuando la sonda se inserta en el plasma, se crea una diferencia de potencial. El plasma puede tener un potencial  $\varphi_s$  diferente del potencial de la sonda  $\varphi_p$ . Como resultado, se forma una funda alrededor de la sonda, cuyo espesor se supone que es un múltiplo de la longitud de Debye  $\lambda_D$ . El espesor de la funda es directamente proporcional al potencial de la sonda. Fuera de la vaina, la sonda no perturba el plasma.

El potencial de la sonda se aplica a menudo en forma de onda de diente de sierra. El potencial de la sonda y la corriente medida se utilizan para estudiar las características de la sonda. La densidad de carga y la temperatura se pueden determinar a partir de las características de la sonda. El número de partículas cargadas se puede calcular a partir de la siguiente ecuación.

$$n = (4I_{p0} / A_p q v) \tag{9}$$

 $I_{p0}$  es la corriente de la sonda cuando el potencial de la sonda es cero,  $A_p$  es el área efectiva de la sonda, q es la carga de la partícula y v es la velocidad promedio de la partícula. La velocidad media viene dada por

$$v = \sqrt{8kT/\pi m} \tag{10}$$

donde k es la constante de Boltzmann y m es la masa de la partícula. La temperatura de las partículas cargadas se puede obtener a partir de la pendiente de las características de la sonda en una escala semilogarítmica del voltaje como se muestran en la Figura 5.



Figura 5. Curva característica de una sonda de Langmuir simple (arriba) y una doble (abajo)

$$T = -(q/k_B) \, d/dU_p \{ Ln(I_p/I_{p0}) \}$$
(11)

donde  $U_p$  es el potencial de la sonda aplicado e  $I_p$  es la corriente de la sonda,  $I_{p0}$  es la corriente de la sonda cuando  $U_p = 0$ .

Las sondas de Langmuir son técnicamente simples y fáciles de implementar. A partir de simples mediciones de voltaje y corriente de la sonda, se pueden calcular muchas propiedades del plasma, como densidades de carga y temperaturas. Sin embargo, hay algunos inconvenientes. Es necesario conocer la masa de los portadores de carga. El plasma se ve perturbado por la introducción de la sonda y provoca un drenaje de los portadores de carga.

### 5. Aplicaciones de la tecnología del plasma

Tal y como se ha mostrado anteriormente, existen equipos de plasma de características muy diferentes (estructura, suministro eléctrico, temperatura del plasma, condiciones de operación). Por lo tanto, sus aplicaciones son muy variadas.

A continuación se presentan las principales aplicaciones de la tecnología de plasma, principalmente en el ámbito de los tratamientos superficiales.

Análisis espectroscópico:

Existen fuentes de plasma que se utilizan actualmente como fuentes de excitación para análisis espectroscópico. Las principales aplicaciones en este sentido se encuentran en la espectrometría de masas de plasma de acoplamiento inductivo (*Inductively Coupled Plasmas Mass Spectrometry*, ICP-MS) y en la espectroscopia de emisión óptica de descarga luminiscente (*Glow Discharge Optical Emission Spectroscopy*, GD-*OES*). Recientemente se han desarrollado sistemas analíticos miniaturizados basados en microplasmas.

Tratamientos de gases –Descontaminación y síntesis:

Actualmente se comercializan equipos de plasma (principalmente antorchas de expansión libre) que utilizan procesos en seco a alta temperatura para eliminar contaminantes presentes en corrientes gaseosas (VOCs, CO, CFCs, HFCs, NOx, SO<sub>2</sub>, etc.) de la industria de automoción (gases de combustión de motores), química (disolventes, pinturas, barnices), petroquímica, etc.

El plasma es un medio de alta reactividad química y, por tanto, capaz de sintetizar una gran variedad de productos gaseosos. Las aplicaciones industriales más habituales en esta área son:

Síntesis de acetileno: A partir de hornos de plasma.

Síntesis de ozono: Mediante descargas de corona (equipos de laboratorio) o fuentes DBD (generadores de ozono-industriales).

## Tratamientos superficiales:

La tecnología de plasma permite tratar la superficie de materiales para conseguir los efectos de: limpieza superficial (desengrasado, eliminación de capas de óxido, descontaminación microbiológica), activación superficial (mejora las propiedades absorbentes y adhesivas) y funcionalización mediante recubrimientos (conductividad eléctrica, propiedades barrera química, resistencia a la corrosión, propiedades ópticas, resistencia a la abrasión, etc.). Las etapas de limpieza y activación a menudo preceden a procesos de deposición. Las propiedades fisicoquímicas superficiales son determinantes para obtener recubrimientos de calidad.

## Limpieza superficial:

Consiste en la eliminación de contaminantes (aceite, polvo, óxidos, agentes biológicos y químicos, etc.) presentes en la superficie de sustratos sólidos.

Los procesos de desengrase se llevan a cabo en baños de disolventes halogenados desde hace muchos años. Sin embargo, los efectos perjudiciales al medio ambiente (disminución de la capa de ozono, efecto invernadero, lluvia ácida, *smog*-fotoquímico) junto a las cada vez más estrictas normas ambientales (Protocolo de Montreal, Reglamento CE 2037/2000) requieren de alternativas entre las que se encuentra la tecnología de plasma.

# Referencias

- 1. http://www.colorado.edu/physics/2000/bec
- 2. http://www.bec.nist.gov/
- 3. <u>http://www.ee.nmt.edu/~langmuir/langmuir.html</u>
- 4. <u>http://fusedweb.pppl.gov/CPEP/Chart\_Pages/5.Plasma4StateMatter.html</u>
- 5. Hippler, R., Pfau, S., Schmidt, M., Schoenbach, K. H., Low Temperature Plasma Physics: Fundamental Aspects and Applications, Wiley-VCH, NY, 2000.
- 6. H.E. Wagner, R. Brandenburg, K.V. Kozlov, A. Sonnenfeld, P. Michel, J.F. Behnke, The barrier discharge: basic properties and applications to surface treatment, Vacuum, 71 (2003) 417-436.
- J. Meichsner, Low Temperature Plasmas, in: A. Dinklage, T. Klinger, G. Marx, and L. Schweikhard (Eds.) Plasma Physics: Confinement, Transport and Collective Effects, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2005, pp. Ch. 5.
- 8. Gordillo Vazquez, J.M. Albella, 2003, Distinct no equilibrium plasma chemistry of C2 affecting the synthesis of nanodiamond thin film from C2H2 (1%) AR/rich plasmas. Journal of Applied Physics, vol. 94, p. 6085-6090.
- 9. Smirnov, B. M., Introduction to Plasma Physics, Mir Publishers, Moscow, 1977.
- 10. The National Research Council, Plasma Science: From Fundamental Research to Technological Applications, National Academy Press, Washington, D.C., 1995.
- 11. Wilson, R.G., Brewer, G. R., Ion Beams: With Applications to Ion Implantation, Robert E. Krieger Publishing Company, Huntington, NY, 1973.
- 12. Loeb, L., B., Electrical Coronas: Their Basic Physical Mechanisms, University of California Press, Berkeley, 1965.

- 13. Anikin, N. B., Pancheshnyi, S. V., Starikovskaia, S. M., Starikovskii, A. Y., "Air Plasma Production by High Voltage Nanosecond Gas Discharge2, AIAA 2001-3088.
- Aleksandrov, N. L., Anikin, N. B., Bazelyan, E. M., Zatsepin, D. V., Starikovskaia, S. M., Starikovskii, A., Y., "Chemical Reactions and Ignition Initiation in Hydrocarbon-Air Mixtures by High Voltage Nanosecond Gas Discharge", AIAA 2001-2949.
- 15. Shale, C. C., Bowie, W. S., Holden, J. H., Strimbeck, G. R., "Characteristics of Positive Corona for Electrical Precipitation at High Temperatures and Pressures", United States Department of the Interior, Bureau of Mines, 1964.
- 16. Vinogradov, J., Sher, E., Rutkevich, I., Mond, M., "Voltage-Current Characteristics of a Flame-Assisted Uni-polar Corona", Pearlstone Center for Aeronautical Studies, Dept. of Mechanical Engg., Ben-Gurion University of the Negev, Beer Sheva, 84105 Israel, 2001.
- 17. Chernikov, V. Ershov, A., Shibkov, V., Timofeev, I., Timofeev, B., Vinogradov, V., Van Wie, D., "Gas Discharges in Supersonic Flows of Air-Propane Mixture", Moscow State University, Moscow, Russia, 2001.
- Adamovich, I. S.D. Baalrud, A. Bogaerts, P.J. Bruggeman, M. Cappelli, V. Colombo, U. Czarnetzki, U. Ebert, J.G. Eden, P. Favia, D.B. Graves, S. Hamaguchi, G. Hieftje, M. Hori, I.D. Kaganovich, U. Kortshagen, M.J. Kushner, N.J. Mason, S. Mazouffre, S.M. Thagard, H.R. Metelmann, A. Mizuno, E. Moreau, A.B. Murphy, B.A. Niemira, G.S. Oehrlein, Z.L. Petrovic, L.C. Pitchford, Y.K. Pu, S. Rauf, O. Sakai, S. Samukawa, S. Starikovskaia, J. Tennyson, K. Terashima, M.M. Turner, M.C.M.v.d. Sanden, A. Vardelle, The 2017 Plasma Roadmap: Low temperature plasma science and technology, J. Phys. D: Appl. Phys., 50, (2017) 323001.
- 19. Y.P. Raizer, Y.P. Gas Discharge Physics, Springer, Berlin, 1991.
- 20. Kogelschatz, U. Dielectric-Barrier Discharges: Their History, Discharge Physics, and Industrial Applications, Plasma Chem. Plasma Process. 23 (2003) 1-46.
- 21. Batani, D., Alba, S., Lombardi, P., Galassi, A., "Use of Langmuir Probes in a Weakly Ionized, Steady-State Plasma With Strong Magnetic Field", Rev. Sci. Instrum. 68 (11), November 1997.