

# ESCUELA DE VERANO EN FÍSICA EN LA UNAM

Primera publicación electrónica: Abril 2025

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.

Escuela de Verano en Física en la UNAM

Realizada en el Instituto de Física y en el Instituto de Ciencias Físicas en  
Junio 17 - 28, 2024

Primera edición electrónica: Abril de 2025

D.R.©2025 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

Jesús Arenas Alatorre	15
<i>Contribuciones de la física al desarrollo de la microscopía electrónica: Teoría y aplicaciones</i>	
María Ester Brandan	34
<i>Conceptos de física de radiaciones relevantes en física médica</i>	
Iliana Carmona Moreno y Arturo Camacho Guardián	41
<i>Excitoness-polaritoness</i>	
Kenia Zamora, Alan Reyes, Ruben D Muelas-Hurtado, y Víctor Contreras	50
<i>Construcción de levitadores acústicos de onda estacionaria empleando arreglos de transductores piezoelectrónicos ultrasónicos</i>	
Jerónimo Cortez	65
<i>Cuantización: el problema de las ambigüedades</i>	
Carlos A González-Gutiérrez, Montserrat Córdova-Rios, Anahí Olmedo-Rodríguez, Luis M Bustamante-Vargas	83
<i>Introducción a los qubits superconductores</i>	
Antonio Marcelo Juárez Reyes	94
<i>Fundamentos y aplicaciones de espectroscopía desde el infrarrojo hasta los rayos X</i>	

Ricardo Méndez-Fragoso y Juan Pablo Cordero Santiago	103
<i>Soluciones a la ecuación no lineal de Schrödinger ¿Qué hacemos con ellas si ya no tenemos superposición de estados?</i>	
W. Luis Mochán y Guillermo Ortíz	116
<i>Photonic: Un paquete para el cálculo de propiedades ópticas de meta-materiales y cristales fotónicos</i>	
José Récamier Angelini, Luis A. Medina Dozal y Alejandro Urzúa	150
<i>Evolución temporal de un sistema optomecánico con acoplamientos lineal y cuadrático</i>	
Ricardo Román Ancheyta	161
<i>Combate entre la radiación de Casimir y los atajos a la adiabaticidad</i>	
Juan de Dios Rojas Olvera y José Alberto Vázquez	178
<i>Optimización de sistemas astrofísicos y cosmológicos con redes neuronales físicamente informadas</i>	
Socorro Valdés	197
<i>Perpectiva microestructural y mecánica del sistema AlZnAb</i>	

## • Introducción

*La XXXI Escuela de Verano en Física fue organizada por el Instituto de Física y el Instituto de Ciencias Físicas, de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). La Escuela, realizada en el periodo comprendido entre el 17 y el 28 de junio de 2024, se llevó a cabo de forma híbrida. Este esquema favoreció la participación de estudiantes de diversas entidades dentro de la República Mexicana y de entidades académicas hermanas localizadas en Honduras, Guatemala, Perú 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 14 cursos y 36 conferencias cubriendose 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 y tecnologías cuánticas entre otros.*

Rocío Jáuregui, IF UNAM  
José Récamier, ICF UNAM  
Abril, 2025

- **Agradecimientos**

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

*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 híbrido.*

*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)

1. Myriam Mondragón Ceballos (IF), *Física de partículas elementales y astropartículas*.
2. María Ester Brandan Siques (IF), *Interacción de rayos X con materia desde la perspectiva de los usos médicos*.
3. Rosario Paredes Gutiérrez (IF) , *Transporte y localización en sólidos cristalinos y desordenados*
4. Jesús Angel Arenas Alatorre (IF), *Contribuciones de la física al desarrollo de la microscopía electrónica: Teoría y aplicaciones*.
5. Rafael Angel Barrio Paredes (IF), *La física en la biología*.
6. Vladimir Avila Reese (IF), *La evolución de galaxias en la red cósmica de materia oscura: teoría y observaciones*.
7. Luis Armando Acosta Sánchez (IF), *Instrumentación nuclear: desarrollos tecnológicos recientes y sus alcances en las ciencias nucleares*.
8. Penélope Rodríguez Zamora (IF), *Quiralidad en nano y micro - sistemas con interfaz molecular*.
9. Juan Rubén Gómez Solano (IF), *Materia activa*.
10. Miguel Alcubierre Moya (ICN), *Introducción a la relatividad numérica*.
11. Wolf Luis Mochán Backal (ICF), *Metamateriales*
12. Víctor Ulises Contreras Loera (ICF), *Curso teórico-práctico: Diseño y construcción de levitadores acústicos basados en tecnología de arreglos de fase*.
13. Maximino Aldana González (ICF), *Modelos de las relaciones simbólicas entre bacterias y humanos: un enfoque desde los sistemas complejos*.
14. Humberto Saint Martin Posada (ICF), *Taller corto de modelado y simulación de sistemas moleculares*.

- Profesores participantes (conferencias)

1. Yonatan Betancur Ocampo (IF), *Transiciones topológicas de fase doble en cadenas de Su-Schrieffer-Heeger acopladas*.

2. Jerónimo Alonso Cortéz Quezada (FC), *Cuantización: el problema de las ambigüedades.*
3. Margarita Rivera Hernández (IF), *Películas moleculares: desde sistemas de detección hasta elementos de conservación de energía.*
4. Marcos Alejandro García García (IF), *Recalentamiento inflacionario.*
5. Eduardo Peinado Rodríguez (IF), *Física de neutrinos y materia oscura.*
6. Martha Rosete Aguilar (ICAT), *Simulaciones numéricas de la propagación y enfoque de pulsos de luz de femtosegundos*
7. Carlos Francisco Pineda Zorrilla (IF), *Sistemas cuánticos abiertos e información cuántica.*
8. Diego Mauricio Gómez Coral (IF), *Detección de antimateria cósmica y su papel en la búsqueda de nueva física.*
9. Arturo Camacho Guardián (IF), *Fluidos exóticos de luz fuertemente interactuantes.*
10. Denis Pierre Boyer (IF), *Vuelos de Lévy y difusión anómala.*
11. David Angel Ruiz Tijerina (IF), *Exitónica de semiconductores bidimensionales.*
12. Sandra Julieta Gutiérrez Ojeda (IF), *El impacto de la nanociencia en tu vida.*
13. Giuseppe Pirruccio (IF), *Polaritones intercavidad y su dinámica en cavidades fuertemente acopladas.*
14. Daniel José Marín Lambarri (IF), *Experimentos de física nuclear con aceleradores de partículas mexicanos.*
15. Ricardo Gutiérrez Jáuregui (IF), *Optica cuántica de pocos cuerpos.*
16. Juan Carlos Hidalgo Cuéllar (ICF), *Oportunidades de investigación en posgrado en el ICF.*
17. Remigio Cabrera Trujillo (ICF), *Dinámica electrón-núcleo: desde la transferencia de carga hasta la formación de átomos exóticos.*
18. Sergio Cuevas García (IER), *Flujos magnetohidrodinámicos en el laboratorio: experimentación y simulación numérica.*

19. Ricardo Méndez Fragoso (FC), *Soluciones a la ecuación no lineal de Schrödinger, ¿Qué hacemos con ellas si ya no tenemos superposición de estados?*
20. Ricardo Román Ancheyta (CFATA), *Radiación de vacío versus atajos a la adiabaticidad.*
21. Carlos González Gitiérrez (ICF), *Átomos artificiales para información cuántica.*
22. José A. Vázquez González (ICF), *Cosmología observacional con aprendizaje automatizado.*
23. Horacio Martínez Valencia (ICF), *Aplicaciones de la tecnología de plasma.*
24. Mohan Kumar Kesarla (ICF), *Semiconductor physics in photocalatysis.*
25. José Récamier Angelini (ICF), *Sistemas optomecánicos con acoplamiento lineal y cuadrático.*
26. Hernán Larralde Ridaura (ICF), *Caminatas aleatorias en economía, biología y física.*
27. François Leyvraz Waltz (ICF), *Ecuaciones cinéticas en varios sistemas de agregación irreversible.*
28. Sébastien Fromenteau (ICF), *Oscilaciones acústicas de bariones dentro de la distribución de galaxias.*
29. Antonio Juárez Reyes (ICF), *Fundamentos y aplicaciones de espectroscopía desde el infrarrojo medio hasta los rayos X.*
30. Frédéric Masset (ICF), *Anillos de polvo en discos protoplanetarios y formación planetaria.*
31. Socorro Valdés Rodríguez (ICF), *Prespectiva microestructural y mecánica del sistema AlZnAg.*
32. Armando Antillón Díaz (ICF), *Proyecto Sincrotrón mexicano.*
33. Roberto de Jesús León Montiel (ICN), *Tecnologías cuánticas y clásicas asistidas por inteligencia artificial.*
34. Manfred Kraus (IF), *Gravitational waves from scattering amplitudes.*

35. José Alberto Martín Ruiz (ICN), *Fases topológicas: de la materia condensada a las altas energías.*
36. Alberto Güijosa (ICN), *El posgrado en Ciencias Físicas.*

*Simbología:*

<i>CFATA</i>	<i>Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, UNAM</i>
<i>FC</i>	<i>Facultad de Ciencias, UNAM</i>
<i>ICAT</i>	<i>Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, UNAM</i>
<i>ICF</i>	<i>Instituto de Ciencias Físicas, UNAM</i>
<i>ICN</i>	<i>Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM</i>
<i>IER</i>	<i>Instituto de Energías Renovables, UNAM</i>
<i>IF</i>	<i>Instituto de Física, UNAM</i>

- **Alumnos participantes**

1. Elver Juárez Loera, Universidad Autónoma de Zacatecas
2. Karen Ventura Camacho, Universidad Autónoma del Estado de México
3. Josué Acevedo Velasco, Universidad Autónoma del Estado de México
4. Marcos Augusto Rodríguez Castañeda, Universidad de Las Américas, Puebla
5. Montserrat Aranzazú Mendoza Macías, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Guadalajara, Jalisco
6. Enya Mendoza Alejo, Universidad de Las Américas, Puebla.
7. Ariadna Abad Rodríguez, Instituto Tecnológico de Oaxaca, Oax.
8. Luis Bustamante Vargas, Universidad de Sucre, Colombia
9. Irving Eduardo Ramírez Isaac, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez
10. Paola Vanessa Paredes Pérez, Universidad de Las Américas, Puebla.
11. Adriana Hernández Vázquez, Universidad de Las Américas, Puebla.
12. Elias Zacamitzin Angeles, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla.
13. Emily Adriana Morales González, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de México.
14. Miguel Miranda Viramontes, Universidad Autónoma de Zacatecas
15. Adamary Velasquez Navar, Universidad Autónoma de Zacatecas
16. Juan Carlos Garibaldi Vallejo, Escuela Nacional de Estudios Superiores UNAM, campus Juriquilla, Qro.
17. Jesús Daniel Merlan García, Facultad de Ciencias, UNAM
18. Aldo Barranco Lango, Facultad de Ciencias, UNAM
19. Luis Pablo Aldama Molina, Facultad de Ciencias, UNAM
20. Evelyn Venegas Agustín, Facultad de Ciencias, UNAM
21. Lizeth Adriana Meza González, Facultad de Ciencias, UNAM
22. Angel Zidane Mena Tapia, Facultad de Ciencias, UNAM

23. Alan Gabriel Amaro Colín, Facultad de Ciencias, UNAM
24. Leonardo Juárez de Olarte, Facultad de Ciencias, UNAM
25. Joan Emmanuel Flores Castell de Oro, Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN
26. Jimena Monserrat Hernández Gómez, Facultad de Ciencias, UNAM
27. Jorge González Peña, Facultad de Ciencias, UNAM
28. Miguel Ángel Lugo Márquez, Facultad de Ciencias, UNAM
29. Daniela Valentino Salado, Facultad de Ciencias, UNAM
30. Andrés Pérez Caballero, Facultad de Ciencias, UNAM
31. Diana Evelyn Moreno Medrano, Facultad de Ciencias, UNAM
32. Antonio Bringas Cadena, Facultad de Ciencias, UNAM
33. Luz Citlalli Jiménez Terrazas, Facultad de Ciencias, UNAM
34. Adán Carrizales Mancilla, Facultad de Ciencias, UNAM
35. Yared Flores Reyes, Facultad de Ciencias, UNAM
36. Felipe Zúñiga Salinas, Facultad de Ciencias, UNAM
37. Karla Giovana García Hernández, Facultad de Ciencias, UNAM
38. Armando Reyes Casas,
39. Sarahí Vázquez Hernández, Facultad de Ciencias, UNAM
40. Sebastián Chiquete Bustamante, Facultad de Ciencias, UNAM
41. Frida García Abreu, Facultad de Ciencias, UNAM
42. Carolina Raquel Laguna Rangel, Facultad de Ciencias, UNAM
43. Jesús Omar Franco Franco, Facultad de Ciencias, UNAM
44. María Fernanda Cárdenas Hernández, Facultad de Ciencias, UNAM
45. Salma Annette Rodríguez Muñoz, Facultad de Ciencias, UNAM
46. Claudio Abraham Mendoza, Universidad Autónoma Benito Juárez de Oaxaca, Oaxaca.
47. Natalia Robles Alvarado, Universidad Autónoma de Zacatecas, Zac.
48. Karen Jatzabel Martínez Antúnez, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

49. Mariana Itzel Martínez Hernández, Facultad de Ciencias, UNAM
50. Axel Joseph Olvera Laguna, Facultad de Ciencias, UNAM
51. Rafael Andrés Valadez Ramírez, Facultad de Ciencias, UNAM
52. Arturo Sebastián Ayala Ruano, Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Yucatán
53. Eduardo García Castrejón, Universidad Autónoma del Estado de Morelos
54. Carolina Lira Gómez, Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN
55. Jenny Guadalupe Rojas Alcantara, Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN
56. Luis Ernesto Garduño Garrido, Facultad de Ciencias, UNAM
57. Zaira Yessenia Saucedo Chávez, Facultad de Ciencias, UNAM
58. Said Josué Zerqueda Gordillo, Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN
59. Flor Elena López Sánchez, Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN
60. Melany Lizeth Martínez Manzo, Facultad de Ciencias, UNAM
61. Mario Alberto Pérez Ocampo, Facultad de Ciencias, UNAM
62. Ángel David Pérez Hernández, Facultad de Ciencias, UNAM
63. José Javier Martínez Luengas, Facultad de Ciencias, UNAM
64. Alondra Cortés Avelar, Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN
65. Ángel Israel Ortega Pazos, Facultad de Ciencias, UNAM
66. Mario Alberto Pérez Ocampo, Facultad de Ciencias, UNAM
67. Luis Ernesto Garduño Garrido, Facultad de Ciencias, UNAM
68. Rodrigo Segura Moreno, Facultad de Ciencias, UNAM
69. Iliana Carmona Moreno, Facultad de Ciencias, UNAM
70. Luis Damián Anaya Martínez, Facultad de Ciencias, UNAM
71. Miroslava Ortiz Perales, Universidad Autónoma Metropolitana

72. Iván Rubén Díaz Ramírez, Universidad Autónoma del Estado de México
73. Eliseo Orta Salinas, Universidad Autónoma del Estado de México
74. Yant-tzeen Lay Victorio, Facultad de Ciencias, UNAM
75. Daniela Ortega Velásquez, Facultad de Ciencias, UNAM
76. Kevin Emmanuel Campos González, Universidad Autónoma del Estado de México
77. Angel Manuel Valdivieso Villegas, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo
78. Arturo González Valencia, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo
79. Alejandra Hernández Pinzón, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
80. Renieri Danilo Ferrari Santos, Universidad Autónoma de Honduras
81. Brayan Esteban Walteros, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Colombia.

# Contribuciones de la Física al desarrollo de la Microscopía Electrónica: Teoría y aplicaciones

Jesús A. Arenas Alatorre

*Instituto de Física UNAM*

## 1. Introducción

La Física, además de ser la ciencia que nos ayuda a entender los fenómenos que pasan en el universo a través de leyes fundamentales, y el conocimiento de la energía, el tiempo, el espacio y la materia, ha sido fundamental en el desarrollo tecnológico alcanzado por la humanidad. Uno de esos grandes desarrollos tecnológicos que se basan en leyes y teorías de la física son las técnicas de Microscopía Electrónica, qué a su vez han ayudado a conocer la materia hasta la escala atómica, adicionalmente nos han proporcionado información de sus propiedades magnéticas y eléctricas. Hoy en día el avance tecnológico de un Microscopio Electrónico de barrido (SEM, por sus siglas en inglés), alcanza hasta 7 Å ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ ), por su parte un moderno Microscopio Electrónico de Transmisión (TEM, por sus siglas en inglés) con corrector de aberración esférica, tiene una resolución de hasta 40 pm ( $1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$ ), es decir, resolución capaz de darnos información de un solo átomo, hecho inimaginable hace 30 años [1]. Por otra parte, diferentes métodos de operación de un microscopio electrónico han mejorado considerablemente en los últimos años, aumentando la capacidad de análisis de materiales y muestras biológicas. Entre estos modos de operación utilizado de manera frecuente hoy en día se tiene a la Microscopía Electrónica de Transmisión de Alta resolución (HRTEM), Microscopía Electrónica de Barrido por Transmisión (STEM, del inglés Scanning Transmission Electron Microscopy), Imagen en Campo Obscuro a Ángulo Grande en Alta Resolución (HR-HAADF, del inglés High Resolution - High Angle Annular Dark Field), Crio-Microscopía Electrónica, Tomografía Electrónica, holografía electrónica, Microscopía de Lorentz, Difracción Electrónica, Difracción de Electrones por Precesión, Espectroscopía por Pérdida de Energía de Electrones (EELS, del inglés Electron Energy Loss Spectroscopy), entre otras. Este manuscrito tiene como objetivo dar a conocer las bases físicas sobre la que se basa el funcionamiento de un Microscopio Electrónico y de las diferentes técnicas asociadas.

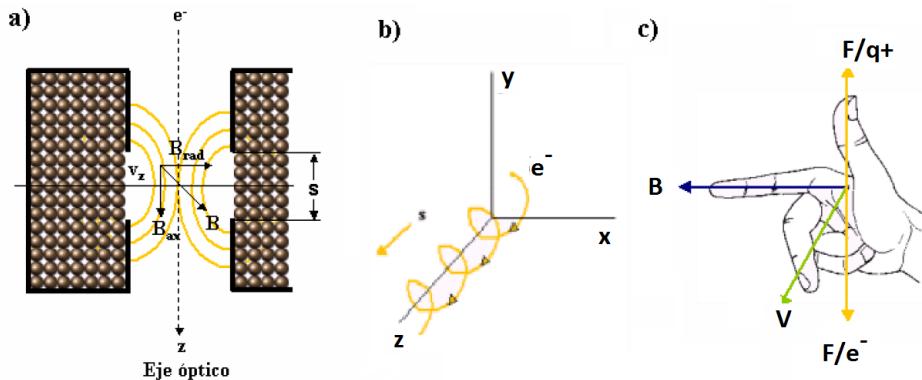
## 2. Cronología de la Microscopía Electrónica

En el año 1931 Max Knoll, profesor de la Universidad Técnica de Berlín, y Ernst Ruska Físico Alemán y quien fue estudiante de Knoll, inician la construcción del primer microscopio electrónico, utilizando para ello bobinas electromagnéticas que hacen el símil de una lente de vidrio en un microscopio de luz. Para ello se basaron en la Ley de

Lorentz (ley formulada en el año 1895), la cual nos indica que si una partícula cargada ( $q_0$ ) se mueve en una región en la que existe tanto un campo eléctrico ( $\mathbf{E}$ ) como uno magnético ( $\mathbf{B}$ ), la fuerza resultante ( $\mathbf{F}$ ) queda determinada por la siguiente ecuación.

$$\mathbf{F} = q_0\mathbf{E} + q_0(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad \text{ec (1)}$$

En el caso de un microscopio electrónico  $q_0$  es la carga eléctrica del electrón, y no hay un campo eléctrico ( $\mathbf{E}$ ), por lo que el primer término es cero. Desde el punto de vista descriptivo la ecuación anterior nos indica que la partícula cargada  $q_0$  describe una trayectoria helicoidal a lo largo de las líneas de campo magnético, tal como se indica en la figura 1.



**Figura 1.** Esquema de una lente electromagnética. a) Representación de las líneas de campo magnético asociadas a la lente, las componentes  $B_{rad}$  y  $B_{ax}$  del campo magnético  $\mathbf{B}$  y la componente de la velocidad del electrón en la dirección  $z$ ,  $v_z$ . b) Trayectoria helicoidal de un electrón moviéndose al interior del campo magnético. c) Regla de la mano derecha indicando la dirección de la fuerza  $\mathbf{F}$ , a la que es sometido el electrón,  $-e$ , en relación con la dirección de su movimiento  $\mathbf{v}$ , y con la dirección del campo magnético  $\mathbf{B}$ ,  $q+$  representa el caso de una carga positiva [1-3].

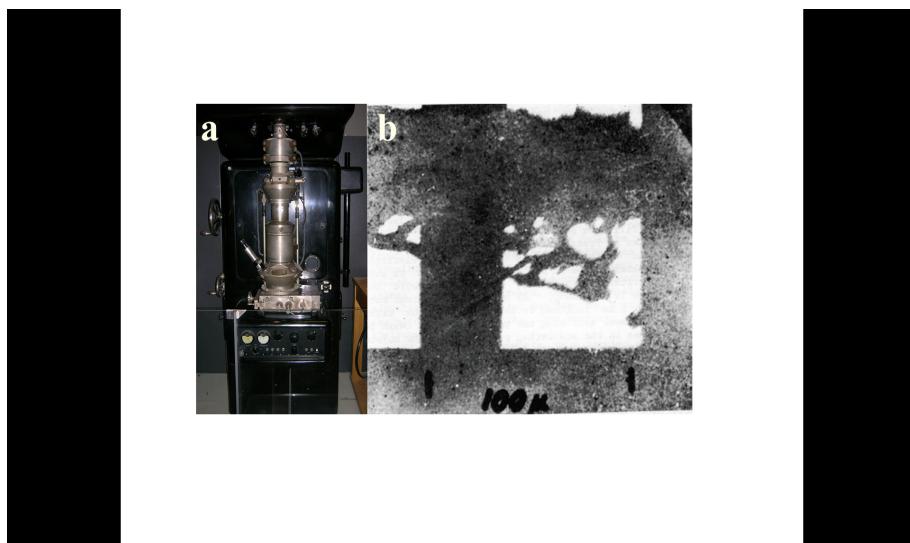
El principio de De Broglie fue el segundo fundamento físico y el que inspiró a Knoll y Ruska en la construcción del primer microscopio electrónico. En 1924, Luis de Broglie, enuncia el carácter ondulatorio de los electrones, la cual se expresa de la siguiente manera:

$$\lambda = h/\mathbf{p} \quad \text{ec (2)}$$

donde  $\lambda$  es la longitud de onda,  $h$ , la constante Plank ( $h = 6.626\ 070\ 15 \times 10^{-34}\ \text{J.s}$ ) y  $\mathbf{p}$ , la cantidad de movimiento ( $\mathbf{p} = mv$ ), en el caso de la microscopía electrónica  $m$ , es la masa del electrón ( $m_e = 9.1 \times 10^{-31}\ \text{kg}$ ).

Por esta aportación en su tesis doctoral en Física, en 1929 Luis de Broglie fue condecorado con el premio Nobel de Física, dos años después Knoll y Ruska obtienen las primeras imágenes con electrones, considerando que si un electrón se comporta como onda, entonces se pueden formar imágenes con electrones. En 1933, Knoll y Ruska dan a conocer un microscopio electrónico con resolución de 50 nm, financiado por la empresa Siemens, que supera en resolución a un microscopio de luz (decimas de micrómetro),

con capacidad de lograr amplificaciones de hasta 400X, en la figura 2 se muestra el TEM dado a conocer y una de las primeras imágenes obtenidas.



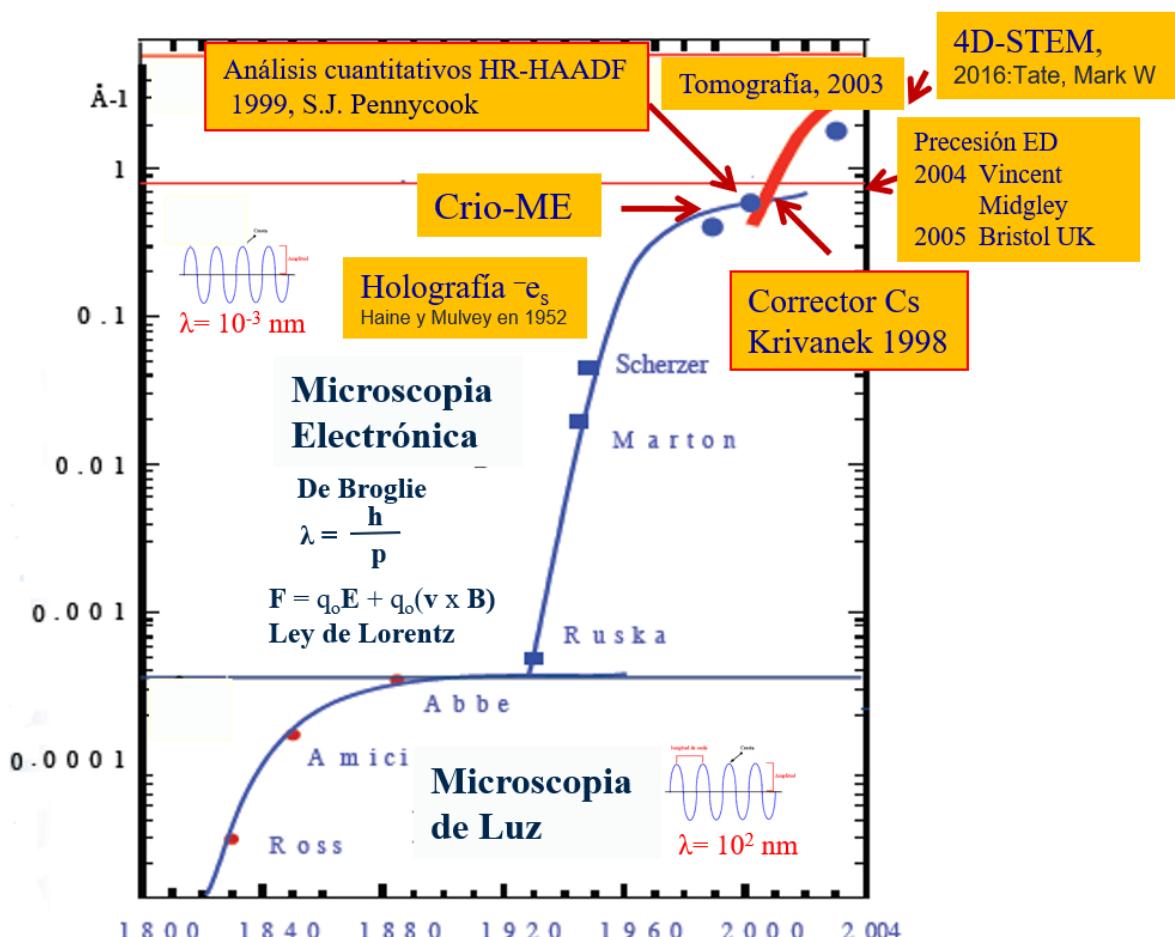
**Figura 2.-** a) Uno de los primeros TEM dados a conocer en 1933, financiado por la compañía alemana Siemens, resolución 50 nm y b) una de las primeras imágenes obtenidas con TEM de una muestra biológica [4, 5].

La figura 4(b), sin lugar a duda, no es de lo más espectacular que se pueda obtener con las técnicas de Microscopía Electrónica, pero fue un parteaguas en la Física, pues se pudo demostrar que efectivamente que con electrones se pueden formar imágenes, posteriormente, al desarrollarse las técnicas espectroscópicas como Espectroscopia por Dispersión de Energía de Rayos X (EDS), se pudo comprobar que los electrones producen rayos X característicos de la muestra bajo análisis, corroborando de esta manera el comportamiento dual onda - partícula de los electrones.

Gracias a este desarrollo tecnológico, E. Ruska, 55 años después, en 1986 recibe el premio Nobel de Física, compartiendo el premio con Gerd Binning y Heinrich Rohrer, quienes desarrollaron la Microscopía de Barrido por Tunelaje (STM, del inglés Scanning Tunneling Microscopy), dando origen a la era de la nanotecnología. Es importante mencionar que en el año 1984 falleció Max Knoll, razón por la cual solo Ruska recibió el premio Nobel.

Algunos lectores se preguntarán porque hasta 55 años después de dar a conocer la técnica de Microscopía Electrónica, Ruska recibe el premio Nobel. La razón es que entre 1931 y 1932 la resolución de un microscopio electrónico era solo 10 veces mayor que la de un óptico y alcanzaba amplificaciones comparables con uno de luz. Por esta razón durante mucho tiempo los usuarios de microscopía preferían seguir trabajando con Microscopía de luz. En el año 1986 las condiciones eran ya diferentes, la constante de aberración esférica Cs fue disminuyendo en las lentes electromagnéticas, por lo que la resolución en 1986 en un TEM era del orden de 1.7 Å, resolución suficiente para ver columnas atómicas en los materiales cristalinos.

En la figura 3 se muestra la cronología del desarrollo de la microscopía, tanto de luz como electrónica, en función de la resolución alcanzada, como se observa la microscopía de luz alcanzó su límite de resolución en la década de los 1880s, una vez publicada la teoría de Ernst Abbe, quién estableció las condiciones que deben tener las lentes de un sistema óptico para generar imágenes nítidas y libres de aberraciones esférica, cromática y coma. De estas, la aberración esférica ( $C_s$ ) y la longitud de onda ( $\lambda$ ) son las limitantes principales de la resolución ( $R$ ) de un microscopio, sea de luz o electrónico ( $R = \frac{\lambda^3/4}{C_s^{1/4}}$ ). Los estudios realizados por de Abbe permitieron construir el corrector de aberración esférica (figura 4). En el año 1987 Abbe calculó la máxima resolución que se podía obtener con el microscopio de luz, y mencionó que el microscopio de luz había alcanzado su límite de resolución, décimas de  $\mu\text{m}$ , ya que el intervalo de longitudes de onda de la luz visible es de este orden, para mejorar la resolución se requerirá de un microscopio que trabaje con longitudes de onda menores. Este razonamiento de Abbe se vio realizado con la Microscopía Electrónica, cuyas longitudes de onda están en el intervalo  $0.00370 \text{ nm} - 0.00164 \text{ nm}$ , trabajando a voltajes de aceleración de electrones entre 100 y 400KV, respectivamente. Hoy en día, un TEM moderno con corrección de aberración esférica alcanza los 40 pm.



**Figura 3.-** Cronología de la microscopía de luz y electrónica, en el año 1882 con la teoría óptica de Abbe, la microscopía de luz llega su límite de resolución, y a finales

del siglo XX dan a conocer los correctores de aberración esférica electrónicos ( $C_s$ ) logrando una resolución del orden de decenas de pm [6, 7].

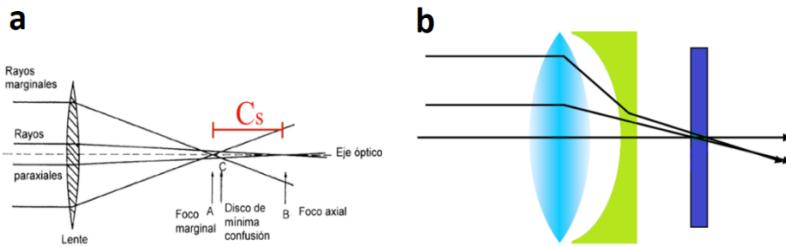


Figura 4.- La constante de aberración esférica  $C_s$ , es la distancia entre la distancia del foco de los “rayos de luz” paraxiales (los que pasan cerca del eje óptico) y la distancia focal de los “rayos de luz” marginales (los que pasan cerca de los extremos de la lente) [3]. b) Arreglo de lentes convergente y divergente para disminuir la aberración esférica.

Entre 1931 y 1980 se fueron dando a conocer importantes avances en la microscopía electrónica, uno de ellos de gran relevancia fue el desarrollado por Scherzer en la década de 1950s, él desarrollo la teoría de imágenes en Microscopía Electrónica de Transmisión de Alta Resolución (HRTEM), dado la importancia de ella para la física, será abordada en la sección IV.2. Otros desarrollos importantes en la Microscopía Electrónica dados a conocer en los últimos 25 años son, el corrector de aberración esférica, cuyo inventor fue Krivanek en el año 1998, con este accesorio, se lograron resoluciones sub-Angstrom; la Crio-Microscopía Electrónica (Premio Nobel de Química 2017, R. Henderson, J. Frank y J. Dubochet); Tomografía Electrónica; HR-HAADF; precesión de difracción electrónica, con la cual se puede obtener toda la información cristalina de las muestras y 4D-STEM, técnica que utiliza un detector de electrones pixelado para capturar un patrón de difracción de electrones de haz convergente (CBED) en cada ubicación de escaneo, lo cual es útil en estudios de análisis de contraste de fase, orientación de fase y mapeo de deformaciones.

### 3. Interacción electrones – materia

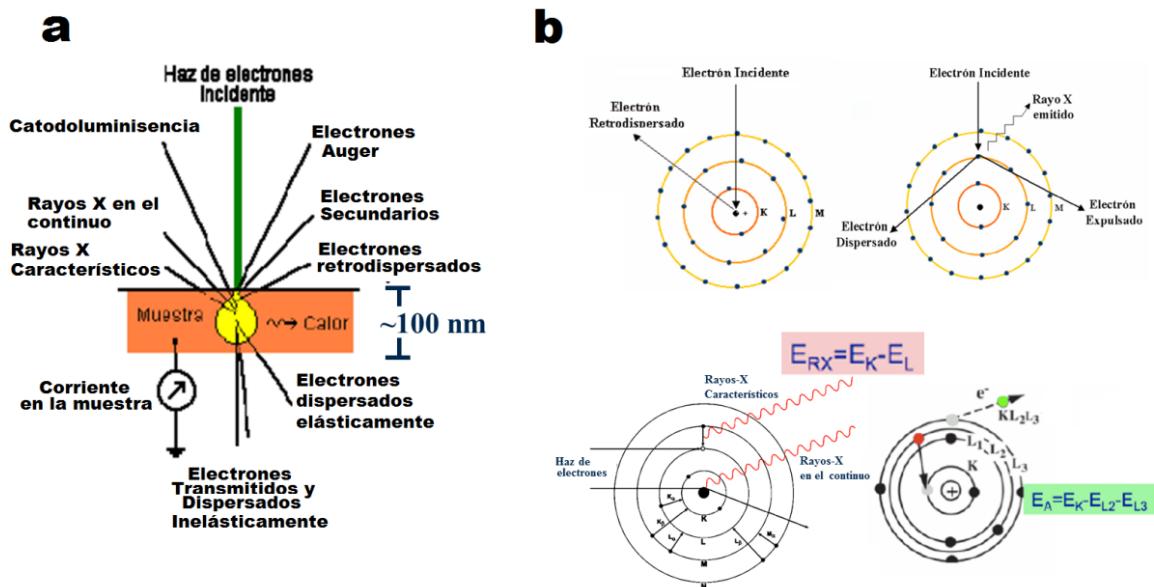
Al interaccionar los electrones con la materia se producen diferentes señales, las cuales con detectores adecuados constituyen cada uno de los modos de operación de un microscopio electrónico, logrando por una parte, formar imágenes y por otra, permitiendo la implementación de técnicas espectroscópicas como EDS, Espectroscopia por Dispersión de Longitud de Onda (WDS, por sus siglas en inglés) y Espectroscopia por Pérdida de Energía de los Electrones (EELS, por sus siglas en inglés). Las señales que se producen al interaccionar el haz de electrones primario con la muestra son mostradas en la figura 5.

Los electrones secundarios y retrodispersados son utilizados para formar imágenes en un SEM, los rayos X característicos proporcionan información de la composición química de la muestra, los electrones Auger son utilizados para conocer la composición superficial

de los materiales, dando información de hasta 1 nm de profundidad. A continuación se da mayor información de estas señales.

### 3.1. Electrones secundarios

Los electrones secundarios son aquellos que escapan de la muestra con energías menores a 50 eV, siendo aproximadamente su profundidad de análisis de entre 5 y 50 nm de la muestra, tal como se indica en la figura 6, pueden considerarse como electrones primarios que al final de su trayectoria en la muestra alcanzan la superficie con una energía de algunos eV. De igual forma pueden ser electrones a los que se les ha transferido una pequeña cantidad de energía, a través de alguna interacción inelástica, en la vecindad de la superficie del material, en la figura 6b los electrones identificados como expulsado y dispersado pueden ser considerados como electrones secundarios. Éstos son muy abundantes y constituyen la señal utilizada para formar la imagen en un SEM con una resolución alta, 3 nm en un equipo de emisión termoiónica y 0.8 nm en un equipo de emisión de campo (Figura 7a), véase sección III.

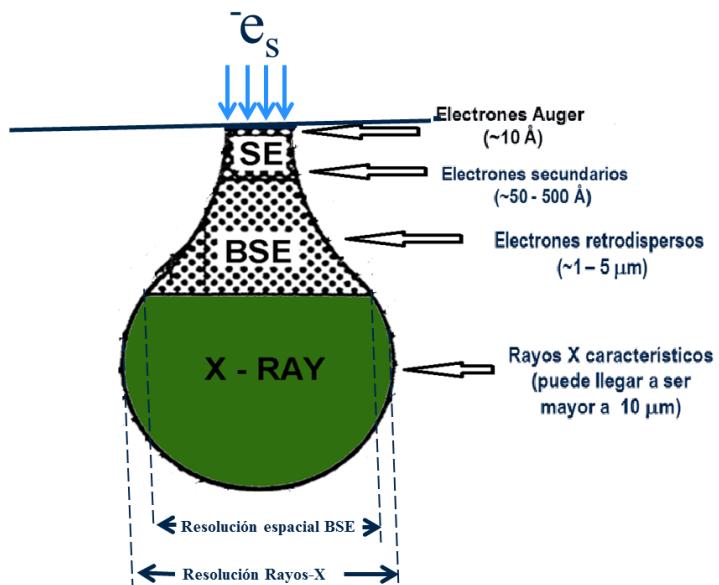


*Figura 5.- a) Señales que se producen al interaccionar los electrones incidentes con la muestra. b) Modelo atómico de Bohr mostrando el origen a nivel atómico de las señales indicadas en (a),  $E_{RX}$ : Energía del Rayo X característico;  $E_A$ : Energía del electrón Auger.*

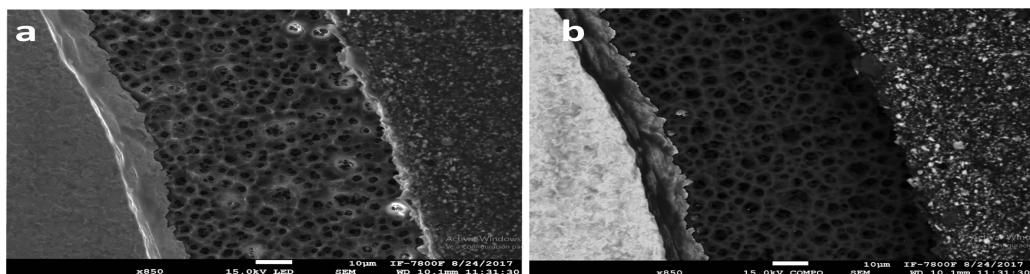
### 3.2. Electrones retrodispersados

Los electrones retrodispersados proporcionan información de una profundidad de la muestra de entre 50 y 500 nm (véase figura 6), son aquellos que proceden de la desviación de los electrones incidentes (sin pérdida de energía) por los campos electrostáticos de los núcleos atómicos de la muestra. Después de una desviación fuerte o de varias débiles, un electrón primario (incidente) puede ser retrodispersado fuera de la muestra con una

energía superior a los 50 eV. La cantidad de electrones retrodispersados es función del número atómico, conforme mayor es el número atómico Z, mayor es la cantidad de electrones retrodispersados. Por tal razón una imagen obtenida en SEM con electrones retrodispersados nos da información de que tan homogénea químicamente es la muestra, si en algunas zonas de la imagen se ve altamente contrastada, significa que en esa zona hay elementos más pesados (Z grande). (Figura 7b).



**Figura 6.-** Esquema que muestra el ancho y profundidad de la que emergen los electrones Auger, los electrones secundarios, los retrodispersados y los Rayos X característicos. El ancho de la señal está asociado con la resolución espacial de cada modo de operación de un SEM.

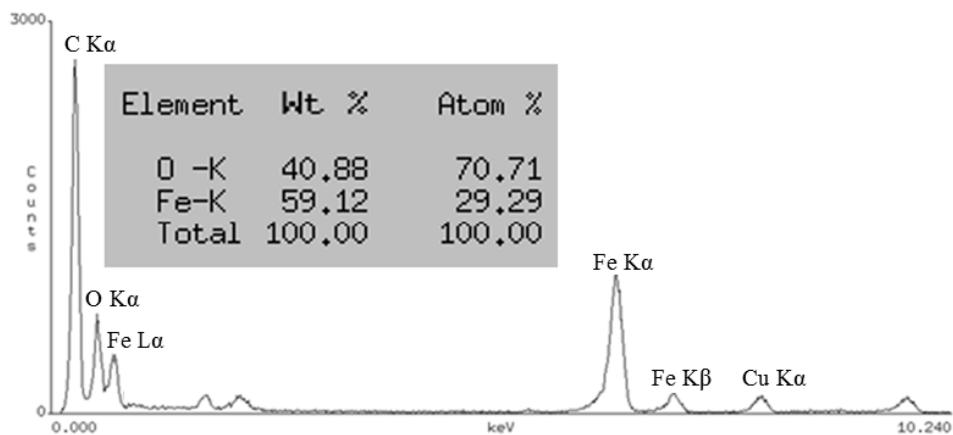


**Figura 7.-** a) Imagen obtenida con electrones secundarios de un circuito electrónico cortado en sección transversal, b) Imagen obtenida con electrones retrodispersados de la misma zona. Como se observa la zona del lado izquierdo de (b) está más contrastada, lo cual indica la presencia con número atómico mayor a los del lado derecho de la

imagen. Del lado derecho, se observa partículas contrastadas que indica la presencia de elementos con número atómico mayor al de la matriz donde se encuentran inmersas.

### 3.3. Rayos X-característicos

Los rayos X característicos se producen como resultados de la interacción del haz de electrones procedentes del filamento del microscopio electrónico con los electrones de los átomos de la muestra quienes se mueven en diferentes niveles o capas de energía alrededor del núcleo. En el caso de la microscopía electrónica, el modelo atómico de Bohr se toma como base, en nivel más próximo al núcleo atómico es el llamado “K” y puede tener hasta dos electrones; los siguientes son los niveles “L” y pueden tener hasta 8 electrones; los tercios son los llamados niveles “M” y tienen 18 electrones como máximo y así sucesivamente. La energía de estos niveles decrece conforme aumenta la distancia al núcleo. Un átomo está en su estado base cuando su energía total es mínima. Cuando los electrones son extraídos del átomo, dejando un hueco en uno de sus niveles energéticos, se dice que el átomo esta “excitado”, para ello se requiere que el haz electrónico tenga una energía mayor que la energía crítica para extraer un electrón de un nivel dado. De esta manera si el haz electrónico tiene la energía suficiente para extraer un electrón del nivel K, es también capaz de excitar los electrones de los niveles L y M. Por lo tanto, las energías de los rayos X característicos son clasificadas de acuerdo con el tipo de transición que las provoca. En la figura 8 se muestra un análisis químico realizado por EDS de una muestra de óxidos de hierro.



**Figura 8.-** Espectro EDS de óxido de hierro, obtenido con los rayos X característicos generados al interaccionar el haz de electrones con la muestras. Se observan los picos correspondiente al Fe ( $K\alpha$ ,  $K\beta$ ,  $L\alpha$ ) , O  $\alpha$ , C  $K\alpha$ , y Cu  $K\alpha$ .

### 3.4. Electrones Auger y radiación por frenado (Bremsstrahlung).

Los electrones Auger son emitidos cuando un electrón de una capa atómica externa llena una vacancia de una capa más interna, el exceso de energía puede inducir que

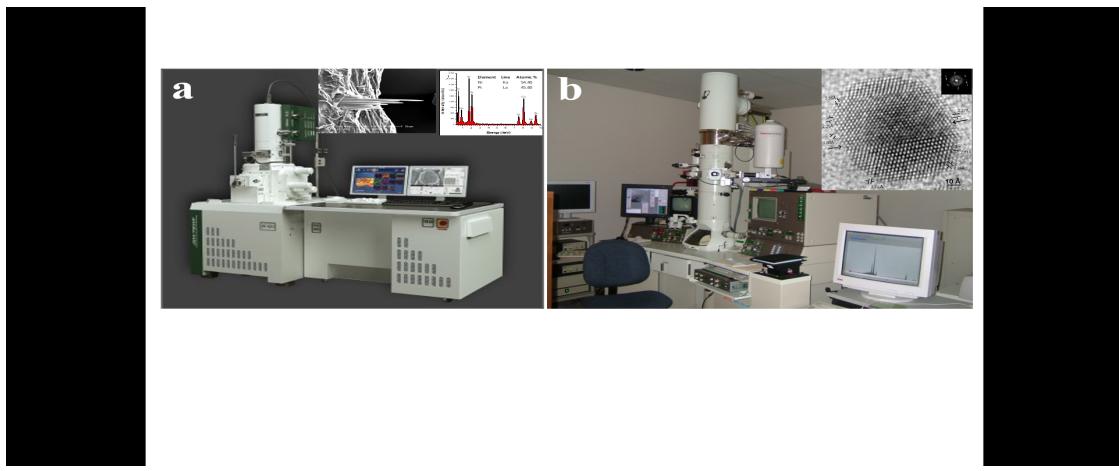
salga un electrón de una órbita externa; convirtiendo esta energía en energía cinética. Su energía es aproximadamente igual a la diferencia de energía entre los orbitales involucrados en la transición. La emisión Auger es más alta en elementos de bajo número atómico debido a que los electrones están débilmente ligados al núcleo. La energía de un electrón Auger ( $E_A$ ), en el supuesto que las órbitas electrónicas involucradas son la K y L, como se indica en la figura 5, queda expresada como:  $E_A = E_K - E_{L2} - E_{L3}$ .

Por otra parte la radiación por frenado, también conocida como Bremsstrahlung (del alemán “bremsen”, frenar y “strahlung”, radiación), se genera cuando un electrón incidente interactúa inelásticamente con el núcleo atómico, cambiando su trayectoria (ver figura 5), como consecuencia, se desacelera y produce la emisión de rayos X en el continuo y por lo tanto su emisión no está asociada a algún elemento químico. En un análisis EDS suele presentarse como una curvatura amplia en el intervalo 0.05 -125 KeV.

## 4. Microscopio electrónico de Barrido (SEM) y Transmisión (TEM)

Como se mencionó en la sección anterior, al interaccionar los electrones con la materia, algunas señales salen hacia el exterior de la muestra, entre ellos, electrones secundarios, retrodispersados, rayos X característicos, radiación de frenado y electrones Auger, las cuales con detectores adecuados constituyen la SEM. Si la muestra es lo suficientemente delgada, digamos 100 nm, algunos electrones atravesarán la muestra, la formación de imágenes con los electrones que se transmiten, se difractan, los que pierden energía, etc. constituyen la TEM.

Cabe destacar que en microscopía electrónica, existen dos tecnologías de emisión de electrones, la termoiónica, que es quasi-monocromática y poco coherente, y la de emisión de campo, que se caracteriza por emitir un haz coherente y monocromático. Con la tecnología de emisión termoiónica (calentando el filamento a  $\sim 1500$  °C), la resolución de un SEM es de 3 nm (trabajando a 30 kV), en tanto que en un TEM es de 0.19 nm (trabajando a 200 kV). Si el SEM es de emisión de campo (electrones generados al aplicar un campo eléctrico  $>10^7$  V/cm), su resolución llega a ser hasta 0.8 nm y un TEM hasta 50 pm en el modo STEM. La diferencia en precio entre cada una de estas tecnologías suele ser mayor a un millón de dólares. En la figura 9 se presentan los equipos SEM y TEM con que cuenta el Instituto de Física UNAM. A continuación, se mencionan algunas características adicionales de SEM y TEM.



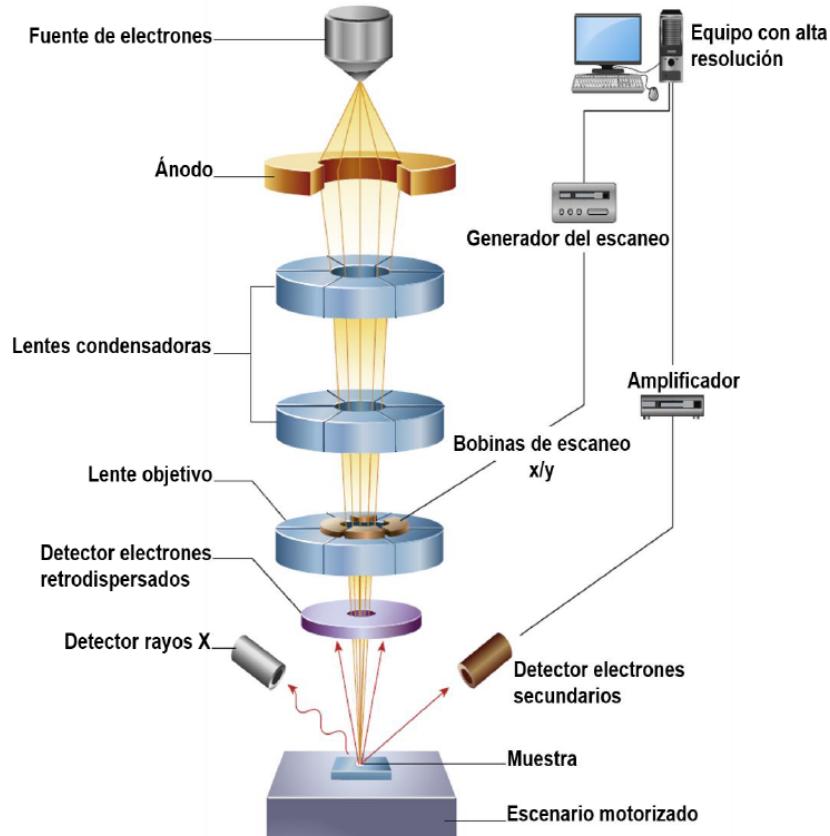
**Figura 9.-** a) SEM JSM7800FEG, con resolución de 0.8 nm. b) TEM JEM2010Feg, con resolución de 1.9 nm.

#### 4.1. Microscopía Electrónica de Barrido (SEM)

Un SEM por su capacidad de correlacionar una imagen con su composición química hasta la escala de nanómetros se ha convertido en una de las principales técnicas de análisis de materiales, proporcionándonos información cristalográfica, de su morfología, topografía y química elemental. Por lo anterior ha contribuido considerablemente en investigaciones en campos como la física del estado sólido, electrónica, ciencia de materiales, polímeros, biología, medicina, arqueometría, entre otros.

En el SEM (Figura 10), el haz de electrones generado por emisión termiónica o de campo, viaja a través de la columna del SEM (Presión  $\sim 10^{-6}$  Torr), hasta llegar a la muestra. Una bobina deflectora genera el barrido, de manera que barre la muestra punto a punto. De la interacción entre los electrones incidentes con los átomos que componen la muestra, se generan las señales mostradas en la figura 5, las cuales son colectadas con detectores específicos para cada una de ellas. El detector captura una señal y las convierte en una señal electrónica que es proyectada en una pantalla [8].

Cabe hacer mención que la columna del microscopio se encuentra en vacío, para un equipo de emisión termoiónica generalmente se utiliza una bomba mecánica y una tubomolecular que alcanza una presión de  $10^{-6}$  torr. En un equipo de emisión de campo se agrega una bomba iónica que llega a una presión de  $10^{-10}$  torr. El sistema de vacío es necesario dado que en su ausencia los electrones viajarían solo algunos milímetros al dispersarse fuertemente por el aire a presión atmosférica; y por otra parte, el filamento de W se oxidaría rápidamente al contacto con el aire por la elevada temperatura, provocando la fundición del filamento.



**Figura 10.-** Partes principales que componen un SEM, incluye fuente de emisión, lentes condensadoras (bobinas electromagnéticas), objetiva (bobina electromagnética), lente de barrido, detectores de electrones secundarios y retrodispersados [8].

#### 4.2. Microscopía Electrónica de Transmisión (TEM)

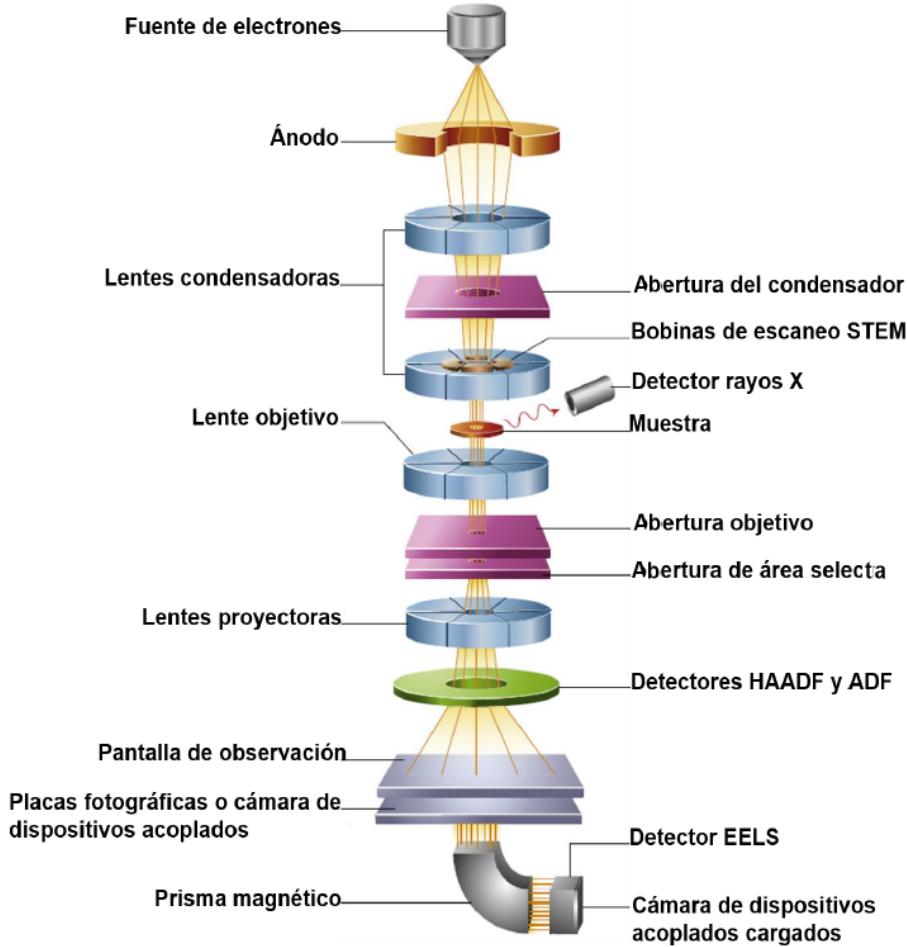
A casi un cuarto del siglo XXI, la resolución de un TEM ha alcanzado los 40 pm, lo cual ha permitido conocer la materia hasta el nivel de un átomo, pero no solamente por la resolución alcanzada es importante, también lo es por las capacidades de análisis asociadas a un moderno microscopio electrónico de transmisión, entre ellas, HRTEM, STEM, HR-HAADF, Difracción por Haz Convergente (CBD por sus siglas en inglés), Crio-Microscopía Electrónica, Tomografía Electrónica, Microscopía de Lorentz, Holografía Electrónica, Difracción Electrónica, Difracción de Electrones por Precesión, y las técnicas analíticas EDS y EELS. La diferencia entre SEM y TEM, es que la primera proporciona información de la superficie de la muestra y la segunda de su estructura.

Por otra parte, la preparación de la muestra para ser observada difiere considerablemente para SEM y TEM, para el SEM el volumen de la muestra puede ser menor de 10 cm<sup>3</sup> (dependiendo del tipo de cámara del SEM), en tanto que para poder ser observada en un TEM, la muestra debe tener un espesor <100 nm. En un TEM los voltajes de aceleración de los electrones están entre los 60 y 300 kV, en tanto que, en un SEM, son <30kV.

Una representación esquemática de un TEM se presenta en la figura 11, una fracción de los electrones emitidos del filamento, que atraviesan la muestra sin ser desviados forman una imagen de campo claro. Si la muestra es cristalina, otra fracción de los electrones son difractados al pasar a través de la muestra generando un patrón de difracción, que es la proyección de la estructura cristalina a lo largo de la dirección de los electrones [8,9].

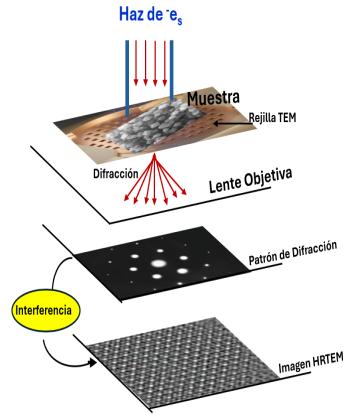
Al atravesar los electrones la muestra, su dispersión puede ser elástica o inelástica. En el caso de la dispersión elástica, los electrones interactúan con el potencial electros-tático del núcleo atómico. Este potencial desvía los electrones incidentes sin ninguna pérdida de energía apreciable, por tanto, es posible, con la detección de estos electrones, obtener imágenes por contraste, imágenes de difracción de electrones e imágenes de HRTEM. En el caso de la dispersión inelástica, los electrones pueden transferir energía a diferentes grados de libertad del átomo. Esta transferencia puede causar excitación o ionización de los electrones, vibraciones en la red cristalina y la posibilidad de calentamiento de la muestra, obteniendo así imágenes por STEM, imágenes por filtrado de energía (EFTEM), HAADF y EELS [8].

La imagen finalmente se proyecta sobre una pantalla fluorescente, alcanzando varios millones de aumentos. En equipos modernos, se coloca debajo de la pantalla una cámara CCD para capturar la imagen, la cual debe estar en vacío al igual que el resto de la columna del microscopio (entre  $10^{-6}$  –  $10^{-9}$  torrs).

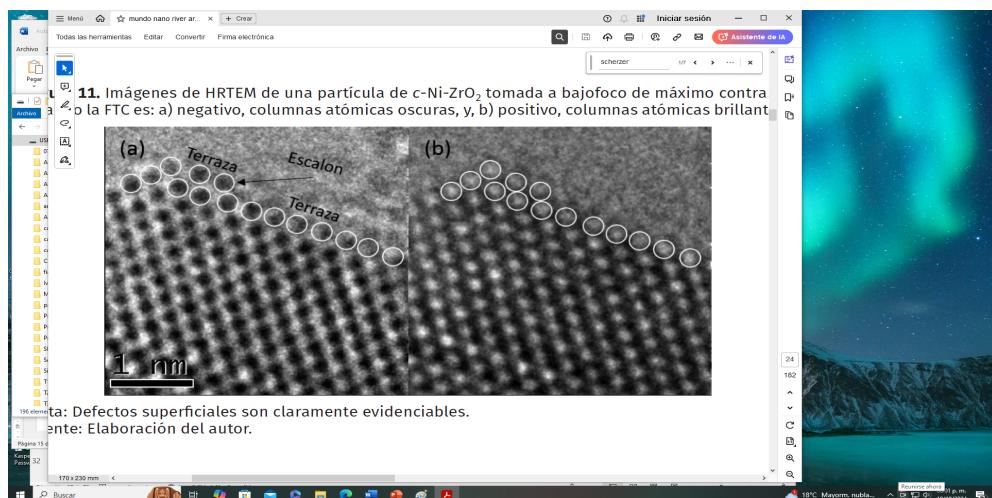


**Figura 11.-** Esquematización de un TEM indicando sus principales componentes [8].

Pese a que se han desarrollado novedosas técnicas de análisis como STEM y HAADF, la técnica de HRTEM sigue siendo ampliamente utilizada, esta permite obtener imágenes de la estructura cristalográfica de una muestra a escala atómica lo que permite obtener imágenes de átomos individuales y defectos cristalinos [10]. Su interpretación no resulta tan trivial ya que cada imagen de TEM y en particular de HRTEM, son imágenes que se capturan en dos dimensiones de un objeto que tiene tres dimensiones, entonces pasar de dos a tres dimensiones suele ser todo un reto. Aunado a ello, dado que una imagen de HRTEM es resultado de un proceso de interferencia, tal como se ilustra en la figura 12, se pueden obtener imágenes cuyos puntos son negros (condición de Scherzer) o bien blancos (figura 13), dicha teoría de formación de imágenes en un TEM la desarrollo Scherzer, dado su importancia es abordada a continuación.



**Figura 12.-** Representación de la formación de imágenes en un TEM. El haz de electrones atraviesa un material cristalino de espesor menor a 100 nm por lo que se presenta el fenómeno de difracción, posteriormente mediante el fenómeno de interferencia se forma la imagen de HRTEM.



**Figura 13.-** Imágenes de HRTEM de una partícula de  $c\text{-Ni-ZrO}_2$  tomada a bajo foco de máximo contraste cuando la Función de Transferencia de Contraste es: a) negativo, columnas atómicas oscuras, y, b) positivo, columnas atómicas brillantes [11].

La resolución de un microscopio electrónico (R) la podemos expresar como función de la  $\lambda$  y aberraciones de las lentes electromagnéticas, especialmente la aberración esférica ( $C_s$ ).

$$R = 0.66 C_s^{1/4} \lambda^{3/4} \quad (3)$$

De esta manera si se opera el microscopio a un voltajes de aceleración de 200kV ( $\lambda = 0.00251\text{nm}$ ) y tiene una  $C_s = 0.5$  mm entonces la resolución del equipo será cercana 1.97 Å. Es decir, conforme aumenta la energía de los electrones, la longitud de onda disminuye. En la tabla 1, se indican las longitudes de onda de los electrones a voltajes que se utilizan en TEM. Dado que en un TEM la velocidad de los electrones suele ser cercanas a las de la luz (0.7  $v_{luz}$ ), se debe considerar la ecuación relativista:

$$\lambda = \frac{hc}{pc} = \frac{hc}{[2m_0c^2K(1 + \frac{K}{2m_0c^2})]^{1/2}} \quad (4)$$

$\lambda$ : Longitud de onda;  $h$ : Constante de Planck =  $6.626 \times 10^{-34}$  J.s =  $4.136 \times 10^{-15}$  eV.s  
 $P$  : Cantidad de movimiento;  $c$  : Velocidad de la luz en el vacío=  $3 \times 10^8$  m/s,  $m_0c^2 = 0.511$  MeV

**Tabla I.**- Longitud de onda de los electrones ( $\lambda$ ) en función del voltaje de aceleración

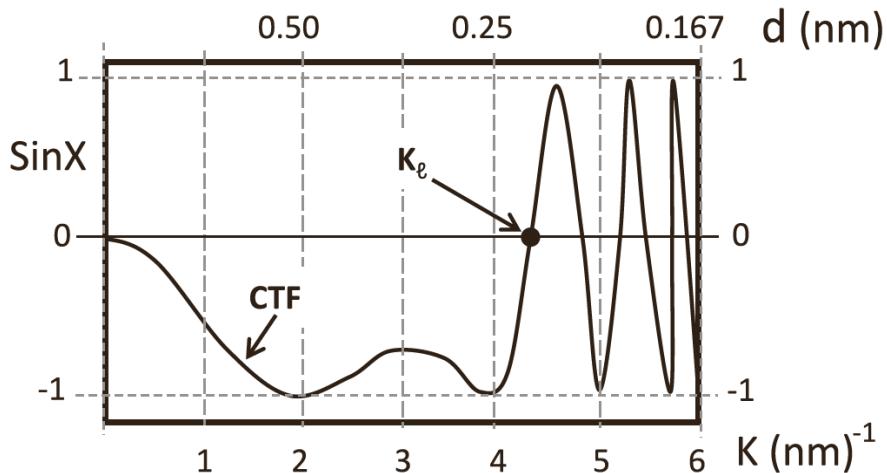
Voltaje de aceleración (kV)	Longitud de onda (nm) no relativista	Longitud de onda (nm) relativista
100	0.00386	0.00370
200	0.00273	0.00251
300	0.00223	0.00197

Adicionalmente, el efecto de aberración cromático disminuye al aumentar el voltaje de aceleración (varía como  $kV^{-1}$ ). El problema con el aumento de energía de los electrones es el daño que causa a las muestras.

En imágenes de alta resolución, los efectos de aberraciones y desenfoque de las lentes objetivas deben ser considerada para dar una interpretación correcta de la estructura cristalina mostrada en las imágenes. Una de las expresiones fundamentales en HRTEM, que refleja los efectos de la aberración esférica ( $C_s$ ), es la correspondiente al cambio de fase [ $\chi(\mathbf{k})$ ] entre un haz de electrones dispersado un ángulo  $\theta$ , respecto de un haz no dispersado:

$$\chi(k) = \frac{\pi}{2} [Cs\lambda^3 k^4] + \pi \Delta f \lambda k^2 \quad (5)$$

donde  $\mathbf{k} = \mathbf{u}\hat{i} + \mathbf{v}\hat{J}$  es el vector de dispersión,  $\left[ |k| = (u^2 + v^2)^{1/2} = \theta/\lambda; u = x/\lambda f; v = y/\lambda f \right]$  y  $\Delta f$  es el desenfoque de la lente objetiva. Otros términos pueden ser incluidos para estimar errores cromáticos, divergencia del haz y ruido mecánico. Esta relación es conocida como la función de transferencia de contraste (CTF), un ejemplo es mostrado en la figura 14, para un TEM trabajando a 200 kV y  $C_s = 1$  mm. El contraste de fase a resolución alta es la parte imaginaria de la CTF.



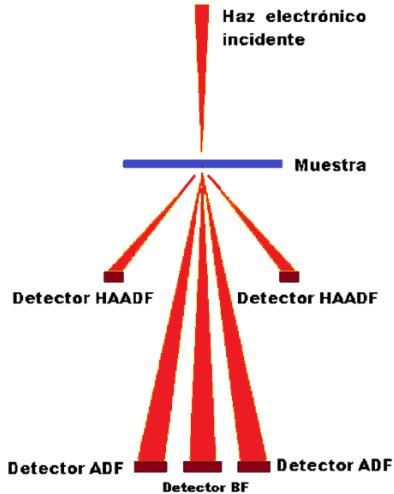
**Figura. 14.** - Función de transferencia de contraste para un TEM trabajando a 200 kV y  $C_s = 1.0$  mm. En  $K_e$  no hay detalle de la imagen y define el límite de resolución del TEM [12].

El valor de desenfoque óptimo es conocido como el desenfoque Scherzer (figura 10a),  $\Delta f_{sch} = (3C_s\lambda/2)^{1/2}$  que se obtiene al igualar a cero la diferencial de la CTF.

En la interpretación de una imagen de HRTEM se deben considerar otros parámetros tales como su espesor y la naturaleza del material. Una interpretación completa se debe hacer mediante el uso de simulación de imágenes para lograr una optimización efectiva de las condiciones experimentales de la imagen.

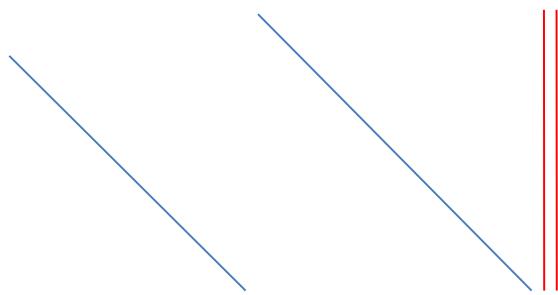
#### 4.3. Microscopía Electrónica de Transmisión por Barrido (STEM) y Campo Obscuro Anular a Ángulo Grande (HAADF)

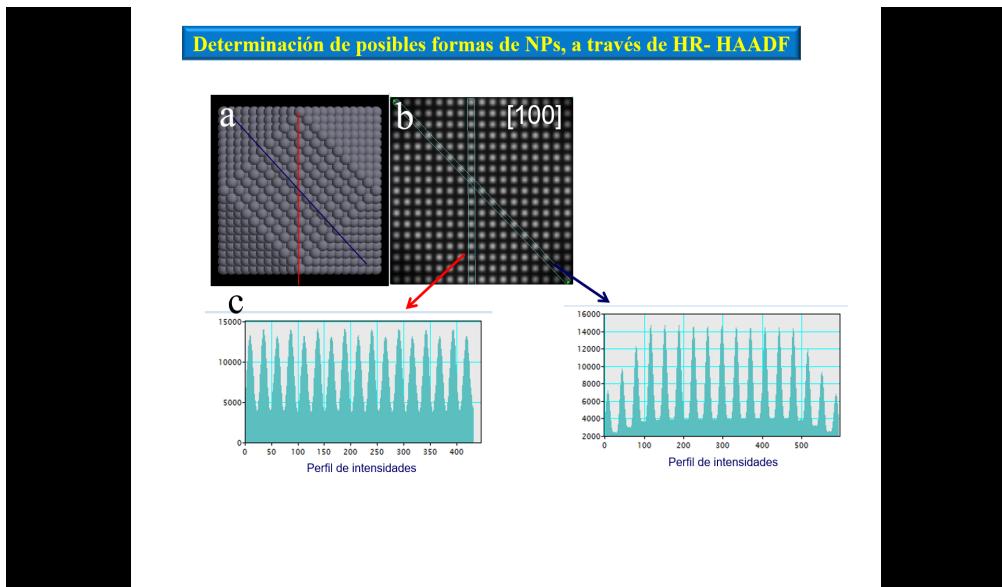
Actualmente STEM se está convirtiendo en el modo de operación de un TEM más utilizada por los usuarios de la microscopía electrónica, entre otras cosas, debido que los correctores de aberración esférica (electrónico) se han acoplado a la unidad STEM, logrando una resolución de hasta 40 pm, lo cual a su vez ha permitido aumentar la resolución de sus capacidades espectroscópicas [13]. En STEM, el haz de electrones incidente se enfoca con diámetro menor a 2 Å sobre la muestra, el haz de electrones siempre debe ser paralelo al eje óptico conforme barre la muestra (Figura 15). Al colocar detectores a varias distancias del eje óptico se registran varias señales de manera simultánea que forman imágenes con características complementarias, tales como imágenes de campo claro (BF), que son los electrones que se desvían muy poco al cruzar la muestra (máximo 10 mrad); campo oscuro (ADF) que serían los haces que forman patrón de difracción, 10 – 50 mrad, HAADF (haces dispersados a ángulos grandes, > 50 mrad).



**Figura 15.-** Esquema del arreglo de detectores (HAADF, ADF y BF) en una unidad STEM

Las imágenes HAADF, técnica muy utilizada hoy en día, se forman mediante la recolección de electrones dispersos en un ángulo grande ( $> 50$  mrad) con un detector acoplado a la unidad STEM. El contraste de las imágenes HAADF es fuertemente dependiente del número atómico Z; el detector evita los haces difractados de Bragg; no se ve fuertemente afectado por el desenfoque; y no se ve fuertemente afectado por las variaciones de espesor de la muestra. Sus aplicaciones incluyen la caracterización de: nanopartículas cristalinas; catalizadores; mapeo de elementos cuantitativos; defectos cristalinos como dislocaciones y precipitados; interfaces de semiconductores; superconductores; pozos cuánticos; películas delgadas multicapa; minerales, etc. En la figura 16 se muestra una imagen simulada de HAADF de una nanopartícula cuboctaedral de Au con su respectivo perfil de análisis de intensidades en dos direcciones (unidades arbitrarias). Donde la intensidad es menor, significa que hay un número menor de átomos en esa columna atómica.





**Figura 16.-** a) Modelo de un Cuboctaedro de Au en la dirección [100]. b) Imagen HR-HAADF obtenida con el software STEM-CELL [14]. c) Análisis de intensidades sobre los dos arreglos de puntos altamente contrastados mostrados en b, realizados con el software Digital micrograph de Gatan.. Nótese que en el arreglo diagonal se aprecia una menor intensidad, lo cual implica una cantidad menor de átomos en las columnas atómicas de sus extremos.

Por último, cabe hacer mención que, en los últimos años, otros métodos de operación por TEM han venido adquiriendo importancia, entre ellos la tomografía electrónica, ha logrado avances importantes para determinar la forma tridimensional de nanopartículas [15], la crio-microscopía, en donde la muestra se congela en fracciones de segundo (vitrificación) para su estudio. Su uso se encuentra principalmente en las áreas biológicas y médicas resolviendo estructuras moleculares y biológicas. Esta última técnica fue desarrollada por Jacques Dubochet, Joachim Frank y Richard Henderson, quienes fueron galardonados con el premio Nobel de Química 2017.

## Referencias

- [1] William D.B., Carter B. (2009). *Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Materials Science*. Springer. Second edition, ISBN 978-0-387-76502-0, New York, USA.
- [2] Díaz Gabriela, Arenas-Alatorre Jesús (2003), Capítulo 17, Vol. 2b del libro: Electrotroquímica y Electrocatalisis, Editado por Nicolás Alonso Vante: "Microscopía Electrónica de Barrido y Técnicas Analíticas Asociadas para la Caracterización de Electrocatalizadores y Superficies de Electrodos". Editorial e-libro.net., Buenos Aires Argentina.
- [3] Yacamán J.M., Reyes Gasga J. (1995). "Microscopía Electrónica, una Visión del Microcosmos. Fondo de Cultura Económica, México.
- [4] De J Brew, uploaded on the English-speaking Wikipedia by en:User:Hat'nCoat. - originally posted to Flickr as Electron Microscope Deutsches Museum, CC BY-SA 3.0, <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=5309032>.
- [5] Marton L. (1968). *Early history of the electron microscopy*. San Francisco Press, 1968

- [6] Pennycook S.J., Varela M., Hetherington C.J.D. and Kirkland A.I. (2006). Materials Advances through Aberration- Corrected Electron Microscopy. *MRS Bulletin*. 31: 36-43. DOI: [10.1557/mrs2006.4](https://doi.org/10.1557/mrs2006.4).
- [7] Rivera M. y Arenas J. (2019). De los micrómetros a los picómetros: evolución de las técnicas de microscopía para el estudio de nanomateriales. *Mundo Nano*, 12(23), 1-25. <http://dx.doi.org/10.22201/ceiich.24485691e.2019.23.67334>
- [8] Inkson, B.J., (2016). Scanning electron microscopy (SEM) and transmission electron microscopy (TEM) for materials characterization. *Materials Characterization Using Nondestructive Evaluation (NDE) Methods* 17–43. doi:10.1016/b978-0-08-100040-3.00002-x
- [9] Rafael Álvarez Chimal, (2022). Evaluación antibacteriana de nanopartículas de óxido de zinc sintetizadas por química verde, en función del tamaño de partícula. Doctorado en Ciencias Médicas Odontológicas y de la Salud UNAM.
- [10] Spence, J.C.H. (1988). *Experimental high-resolution electron microscopy*. New York: Oxford U. Press.
- [11] Ángeles Chávez Carlos. (2020). El rol de la función de transferencia de contraste en la formación de imágenes de resolución atómica de nanopartículas. *Mundo Nano*, 13(25) 9-27. <https://doi.org/10.22201/ceiich.24485691e.2020.25.69617> .
- [12] Akhtar, S. (2012). Transmission electron microscopy of graphene hydrated biomaterials nanostructures: Novel techniques and analysis. *Thesis dissertation*, Faculty of Science and Technology, Uppsala University, Uppsala, Sweden. <http://urn.kb.se/resolve?urn=urn:nbn:se:uu:diva-171991>
- [13] Oxley M.P., Lupini A.R. and Pennycook S.J., (2017). Ultra-high resolution electron microscopy. *Rep. Prog. Phys.* 80: 026101 (64pp). doi:[10.1088/1361-6633/80/2/026101](https://doi.org/10.1088/1361-6633/80/2/026101).
- [14] Vincenzo G. and Rotunno E. (2013). STEM\_CELL: A software tool for electron microscopy: PartI—simulations. *Ultramicroscopy* 125: 97–111. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ultramic.2012.10.016>.
- [15] Sandra Van Aert, Kees J. Batenburg, Marta D. Rossell, Rolf erni and Gustaaf Van Tendeloo. (2011) Three-dimensional atomic imaging of crystalline nanoparticles. *Nature* 2011. doi:[10.1038/nature09741](https://doi.org/10.1038/nature09741) .

# Conceptos de física de radiaciones relevantes en física médica

María Ester Brandan

*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, 04510 Ciudad de México  
[brandan@fisica.unam.mx](mailto:brandan@fisica.unam.mx)*

**Resumen.** Estas notas corresponden a un breve curso en que se presentaron conceptos básicos de física de radiaciones relevantes para entender algunas de las aplicaciones de física en medicina. Se discute radiación ionizante, pérdida de energía de un haz de partículas cargadas (protones o electrones), y atenuación de un haz de radiación indirectamente ionizante (fotones) en un medio. Se mencionan algunos usos médicos en que las propiedades físicas de la radiación utilizada son relevantes.

## INTRODUCCIÓN

Física médica es la aplicación de los conceptos, leyes, técnicas y herramientas de la física en la prevención, diagnóstico y tratamiento de las enfermedades del ser humano. Es un campo interdisciplinario que desde 2008 se incluye entre las profesiones de la salud, de acuerdo con la Organización Internacional del Trabajo [1]. Como rama de la física, la física médica sigue, en su ámbito de investigación, el método científico de las ciencias físicas (en interacción cercana con las ciencias biológicas y de la salud). En el ámbito laboral, quienes desean ejercer la profesión especializada de “físico médico” deben seguir un programa de educación y entrenamiento clínico centrado en la aplicación de los conceptos y técnicas de la física en la medicina que asegure su capacidad de práctica profesional independiente en una especialidad de la medicina [2]. Las principales áreas de especialidad en física médica son la física de las imágenes médicas, de la radioterapia, de la medicina nuclear, de la protección radiológica, y del uso de radiaciones no-ionizantes. Las primeras cuatro se relacionan con el uso de radiación ionizante (RI).

Este escrito resume un breve curso que presentó los conceptos básicos de física de radiaciones que describen las interacciones de la RI con un medio irradiado [3,4]. El objetivo del curso fue relacionar las leyes físicas con el uso de la RI en algunas técnicas médicas actuales. Estas notas se limitan a presentar y discutir brevemente estos conceptos básicos, suponiendo que el lector es estudiante de la carrera de física. Invitamos a quienes se interesan en la física de radiaciones a explorar en profundidad los libros de texto usados como bibliografía de estas notas [3,4]. Quienes desean conocer más sobre los usos de la RI en medicina pueden visitar los recursos electrónicos del Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA) [5] así como otras fuentes de información asociadas con instituciones reconocidas en internet.

## RADIACIÓN IONIZANTE

Radiación es un término con un amplio espectro de significados en el lenguaje común. En física, se entiende por radiación la energía transportada de un lugar a otro por ondas o partículas en movimiento. La capacidad de la radiación para causar ionizaciones atómicas o moleculares en el medio con que interactúa permite clasificarla en ionizante o no-ionizante. Las ionizaciones requieren de energías de una decena de electronvoltos y mayores. Se considera que el umbral para que la radiación se considere ionizante es cercano a los 100 eV.

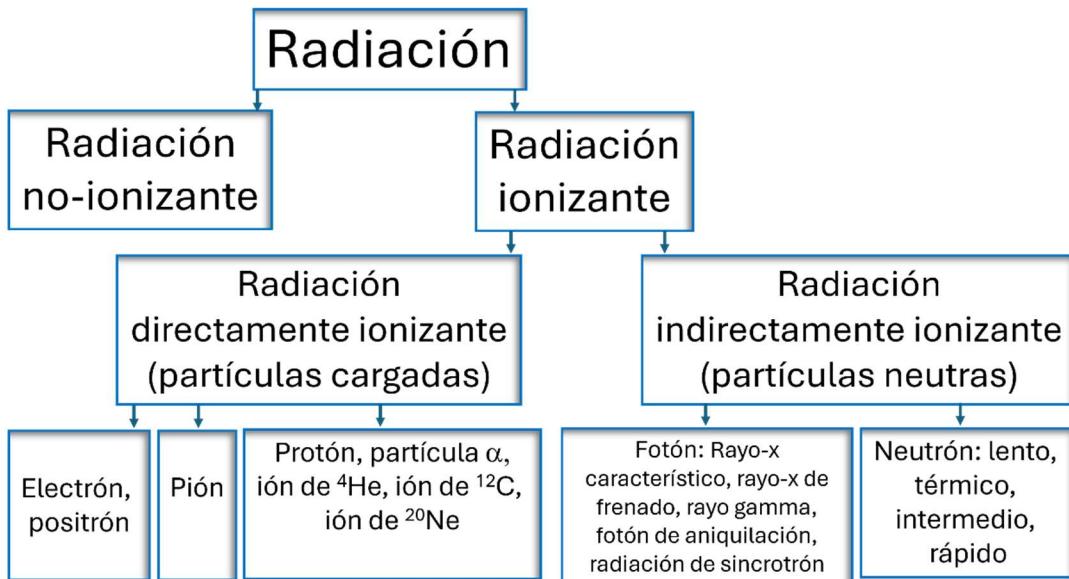


Figura 1. Clasificación de la radiación. Adaptada de [3].

La **radiación no-ionizante** no puede ionizar porque su energía es menor que el potencial de ionización de átomos o moléculas del medio. Entre la radiación no-ionizante se cuentan las formas de energía electromagnética cuyos cuantos de energía no son suficientemente energéticos para ionizar; a este grupo pertenecen las ondas de radio, microondas, fotones infrarrojos, de luz visible y del ultravioleta cercano. Algunos usos médicos de radiación no-ionizante son las técnicas de ultrasonido médico, imágenes de resonancia magnética y las técnicas que usan luz y láseres para generar imágenes y terapias [6].

La **radiación ionizante** (RI) puede ionizar porque la energía transportada por cada cuanto o cada partícula (en forma de energía cinética) es suficiente para liberar un electrón atómico del medio. De especial interés son los usos de la RI en ramas de medicina asociadas con tratamiento y diagnóstico de enfermedades. En radioterapia, también llamada radio-oncología, se imparten grandes cantidades de RI generada en haces o por fuentes radiactivas preferencialmente en las masas celulares malignas (tumores) para controlar su crecimiento y así lograr la curación del cáncer. En radiología diagnóstica, o radiodiagnóstico, se usa la atenuación de haces de rayos-x para generar imágenes bi- y tri-dimensionales del cuerpo con información anatómica. En medicina nuclear, también llamada imagen molecular, se detecta la RI emitida desde el interior del cuerpo por núcleos radiactivos para generar imágenes funcionales de diagnóstico.

La RI se clasifica en directamente- e indirectamente ionizante, dependiendo del modo cómo se ionizan los átomos y moléculas del medio (ver Figura 1). Se llama **radiación directamente ionizante** a las partículas atómicas o subatómicas cargadas que se desplazan en un medio a velocidades relativamente altas (milésimas o más de la velocidad de la luz). La interacción de Coulomb entre las partículas cargadas incidentes y las cargas eléctricas del medio (los electrones orbitales y el núcleo de los átomos) es inevitable y parte de la energía cinética incidente se transfiere directamente al medio a través de muchas interacciones “pequeñas”. Esta energía resulta en la ionización y/o excitación de los átomos y moléculas del medio.

Se llama **radiación indirectamente ionizante** a las partículas neutras (fotones o neutrones) que se desplazan en un medio a velocidades relativamente altas (neutrones) o que cuentan con energías mayores que unos 100 eV, lo que las hace ionizantes. Estas partículas y ondas depositan su energía en el medio a través de procesos en dos etapas. En la primera, el fotón incidente interactúa con alguno de los componentes del medio, en pocas interacciones “catastróficas” que resultan en la desaparición del fotón incidente y la generación (o liberación) de electrones y/o

positrones energéticos. La segunda etapa es la transferencia, por interacciones de Coulomb, de la energía cinética de las partículas liberadas a los componentes del medio. En esta presentación no se discute la interacción de neutrones.

## INTERACCIÓN DE RADIACIÓN DIRECTAMENTE IONIZANTE CON UN MEDIO

Las partículas cargadas pierden energía cinética debido a su campo eléctrico Coulombiano que interactúa con todos los electrones y núcleos de los átomos del medio. Las transferencias de energía en cada interacción son pequeñas, y la partícula cargada va perdiendo poco a poco su energía cinética hasta que se agota. Las interacciones son discretas y se define una magnitud llamada poder de frenado,  $S$ , que cuantifica la energía promedio perdida por una partícula cargada al atravesar una distancia en un medio (expresado en MeV cm<sup>-1</sup>, por ejemplo). El poder de frenado de clasifica en “de colisiones” si se debe a interacciones con electrones del medio que resultan en ionización o excitación, y “radiativo” si es producto de interacciones en que se emite radiación de frenado. La Figura 2.a ilustra el poder de frenado másico (es decir, dividido por la densidad del medio) para protones en varios medios elementales. El poder de frenado depende de las propiedades del medio (densidad y número atómico) y de la masa, carga y energía cinética de la partícula incidente. Presenta un máximo para energías cinéticas relativamente bajas de la partícula, unos 100 keV para el protón, tal como se ve en la Figura 2.a. Esta energía (y el máximo en  $S$ ) ocurren cerca del final de la trayectoria de la partícula cargada.

El poder de frenado es una magnitud esencial en dosimetría (la determinación de la energía absorbida por un medio expuesto a RI). De acuerdo con la teoría de cavidades (el formalismo que permite el uso de cámaras de ionización para medir dosis) la energía absorbida por el medio es proporcional al poder de frenado de las partículas cargadas que lo irradian. Siendo así, el máximo en la curva de  $S$  como función de la energía (Figura 2.a) se traduce en un máximo de la dosis absorbida por el medio al final de la trayectoria. Este máximo se ilustra en la Figura 2.b para protones de 100 MeV incidentes en agua. Para esta energía, el máximo de  $S$  ocurre a 8 cm de profundidad y causa un máximo de dosis absorbida por el agua en esa profundidad, llamado “pico de Bragg”.

El notable pico de Bragg en la Figura 2.b es el origen del interés por radioterapia usando haces de protones e iones, una técnica en pleno desarrollo en la actualidad. La RI se usa en radioterapia buscando impartir suficiente energía para controlar el crecimiento de una masa de células malignas (el blanco terapéutico) y, al mismo tiempo, evitar los efectos posiblemente tóxicos de la radiación en el tejido sano irradiado. La principal ventaja del uso de partículas cargadas “pesadas” (protones e iones) en el tratamiento de un tumor es la existencia del pico de Bragg. Tal como se observa en la Figura 2.b, el depósito de energía ocurre desde la superficie de entrada (0 cm de profundidad en Figura 2.b), alcanza un máximo a una profundidad que depende de la energía del haz incidente, y no hay dosis impartida más allá. Precisamente el uso de protones (o de iones de <sup>12</sup>C en instalaciones de algunos países avanzados) se justifica en tumores que requieren una localización precisa de la dosis para proteger órganos sensibles sanos cerca del blanco terapéutico. Estas situaciones se presentan en cánceres pediátricos y en algunos del sistema nervioso de adultos. Una gran dificultad para implantar la técnica es el elevado costo del acelerador de protones (se requieren haces de 150-250 MeV para tratar tumores profundos) y la complejidad de los procedimientos. Estimaciones actuales indican que una instalación de terapia con protones, equipada apropiadamente para uso clínico, puede costar 10-50 veces lo que una instalación de radioterapia que use técnicas avanzadas de irradiación con fotones.

Los electrones también son partículas cargadas, es decir, directamente ionizantes. Su curva de  $S$  también presenta un máximo y, por lo tanto, hay un máximo de dosis absorbida por el medio al final de la trayectoria. Pero, la masa de los electrones incidentes es igual a la de los electrones del medio, y las múltiples interacciones de un haz inicialmente paralelo con los electrones del medio resulta en que, después de algunas colisiones, las partículas incidentes se dispersen importantemente y el haz se ensanche, impidiendo la formación de un “pico de Bragg” angosto en una profundidad definida. Sin embargo, los electrones tienen un alcance definido (es decir, recorren una distancia finita antes de que agoten su energía) y electrones de entre 6 y 20 MeV son una opción muy conveniente para tratar tumores superficiales ubicados a menos de 5 cm de profundidad. Además, un haz de electrones es fácilmente costeable ya que el instrumento más usado en radioterapia, el linac (acelerador lineal) produce tanto haces de fotones como de electrones.

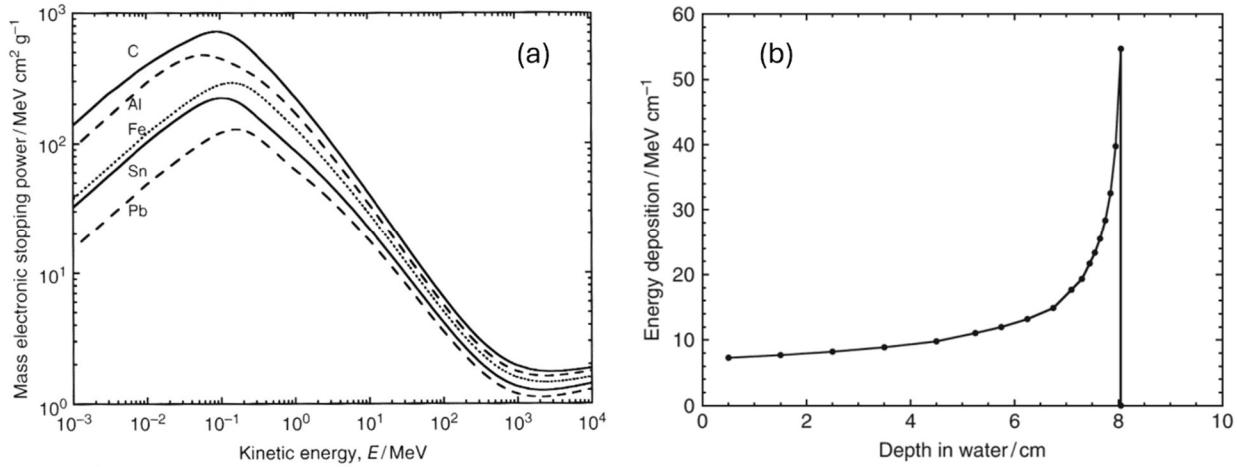


Figura 2. (a) Poder de frenado másico  $S/\rho$  de protones en varios medios. (b) Energía depositada en agua por un haz de protones de 100 MeV, como función de la profundidad en el medio. El máximo del poder de frenado para energías cercanas a 100 keV en (a) se expresa en el máximo depósito de energía al final de la trayectoria de la partícula en el medio, llamado “pico de Bragg”, en (b). Adaptado de [4].

## INTERACCIÓN DE RADIACIÓN INDIRECTAMENTE IONIZANTE CON UN MEDIO

Los fotones interactúan con el medio sufriendo procesos relativamente “catastróficos” que los eliminan del haz incidente, y la intensidad disminuye como función de la profundidad  $z$  en el medio. La intensidad de un haz monoenergético y paralelo como función de  $z$  se describe por una ley de tipo exponencial,  $I(z)=I_0 \exp(-\mu z)$ , en que  $I_0$  es la intensidad del haz incidente. El coeficiente  $\mu$  se denomina coeficiente lineal de atenuación, con unidades de inverso de distancia, por ejemplo, cm<sup>-1</sup>. Este coeficiente representa la probabilidad de sufrir alguna interacción al atravesar una distancia en el medio, y depende de la energía del fotón y del número atómico y densidad del medio. Como  $\mu$  es dependiente de la densidad física del medio, una magnitud más “robusta” es  $\mu/\rho$ , llamado coeficiente másico de atenuación, con unidades, por ejemplo, cm<sup>2</sup> g<sup>-1</sup>.

Hay tres procesos principales de interacción entre fotones y un medio que son relevantes para las aplicaciones médicas de la RI. La dependencia de cada uno con las variables de la interacción es diferente y, ya que los procesos son independientes, la probabilidad de interacción es la suma de las probabilidades para cada proceso. En primer lugar, el efecto fotoeléctrico consiste en la interacción de un fotón con un electrón orbital de los átomos del medio, resultando en la transferencia del cuanto de energía del fotón al electrón que se libera del amarre al núcleo atómico y transforma la energía restante en energía cinética. El átomo se transforma en ion positivo y se crea una vacancia orbital que será posteriormente llenada, acompañado por la emisión de rayos-x característicos (llamados de fluorescencia) del átomo ionizado. El efecto fotoeléctrico elimina un fotón del haz incidente y el electrón energético liberado se transportará en el medio, interactuando con electrones y átomos debido a su campo Coulombiano, hasta que su energía cinética se agote. El coeficiente másico de atenuación para el efecto fotoeléctrico, ilustrado por la curva  $\tau/\rho$  en la Figura 3.a para carbono, depende del número atómico de los átomos del medio elevado a la potencia 3 y de la energía del fotón elevada a la potencia -3. La Figura 3.b indica que este efecto es el dominante para fotones con energías menores que 100 keV que inciden en elementos con número atómico  $Z \leq 20$ . Para elementos de  $Z$  alto (plomo, por ejemplo) el efecto fotoeléctrico sigue siendo el dominante para fotones de hasta 0.5 MeV.

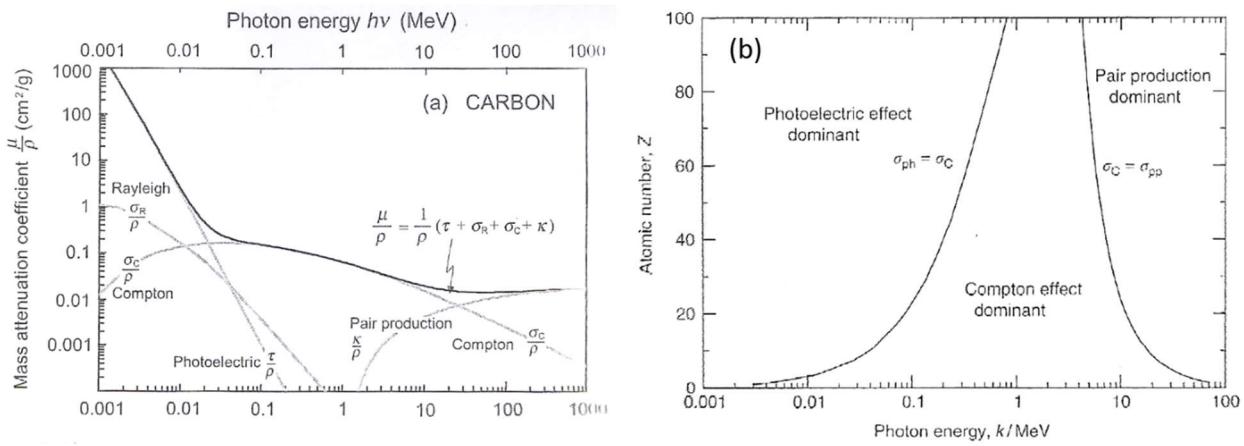


Figura 3. (a) Coeficiente másico de atenuación  $\mu/\rho$  (curva negra) para fotones en carbono como función de la energía del fotón. Las curvas grises muestran valores para el efecto fotoeléctrico, Compton y producción de pares (la dispersión de Rayleigh no se considera relevante para los usos comunes de RI en medicina, y no se discute en estas notas). (b) Regiones en que cada uno de los tres procesos es dominante, para materiales con número atómico  $Z$ , como función de la energía del fotón. Las curvas indican los límites entre regiones. Adaptado de [3 y 4].

El segundo proceso es el llamado efecto Compton, en que el fotón incidente libera un electrón atómico débilmente ligado al átomo del medio. El fotón incidente desaparece y su energía se comparte entre el electrón liberado y un segundo fotón que se emite en una dirección diferente a la del incidente. De esta manera se conservan la energía y el momento lineal. El electrón se desplazará en el medio interactuando con electrones y núcleos atómicos a través de su campo Coulombiano hasta que se agote su energía cinética. El coeficiente másico de atenuación para el efecto Compton, curva llamada  $\sigma_C/\rho$  en la Figura 3.a, depende de la densidad de electrones en el medio, no depende del número atómico de éste, y tiene una débil dependencia con la energía del fotón incidente. Como muestra la Figura 3.b, para medios con  $Z \leq 20$ , el efecto Compton es el proceso dominante entre 100 keV y 10 MeV.

El tercer proceso es la producción de pares, en que un fotón de alta energía se transforma en un par electrón-positrón en las cercanías de un núcleo atómico. Este proceso es ejemplo directo de la equivalencia entre masa y energía y, para que ocurra, el fotón debe contar con más de 1.022 MeV. Esta energía umbral es igual a la masa en reposo de las partículas que serán creadas. En la producción de pares, el fotón incidente desaparece y se crean dos partículas cargadas (que se reparten la energía en exceso de 1.022 MeV del fotón) que se transportarán en el medio interactuando con las partículas cargadas de éste a través de sus campos Coulombianos hasta que se les acabe la energía. El positrón se aniquilará (generalmente a muy baja energía, cerca del reposo) con un electrón del medio. Cuando esto ocurre, se producen dos rayos gamma de aniquilación que continuarán la historia de interacciones, dependiendo de su energía. El coeficiente másico de atenuación para la producción de pares, ilustrado por la curva  $\kappa/\rho$  en la Figura 3.a para carbono, depende del número atómico del medio elevado a la potencia 2, y aumenta con la energía del fotón por encima del umbral. Este es el proceso dominante para medios con  $Z \leq 20$  a energías mayores que 10 MeV (ver Figura 3.b).

Los usos médicos de los fotones son muchos, tanto en radiodiagnóstico como en radioterapia, y se basan -antes que nada- en las propiedades de la interacción de la radiación con los átomos del cuerpo. La principal aplicación médica de fotones de energía efectiva (o promedio), típicamente, de 60 keV, es la obtención de imágenes del interior del cuerpo a través de radiografías (imágenes bidimensionales) y de tomografías con rayos-x (imágenes tridimensionales). La propiedad física aprovechada es la dependencia de la atenuación con  $Z^3$ . Esta característica permitió a W.C. Roentgen en 1895 obtener con éxito la primera imagen radiográfica de una mano, en que los huesos (que contienen Ca,  $Z = 20$ ) se distinguen del tejido blando que lo rodea ( $Z \sim 7$ ) y se ve claramente un anillo (probablemente fabricado con metales de alto  $Z$ ). El avance científico y tecnológico del siglo pasado y actual permite contar ahora con imágenes tomográficas de alta resolución espacial y contraste conseguidas al reconstruir cientos de proyecciones bidimensionales digitales.

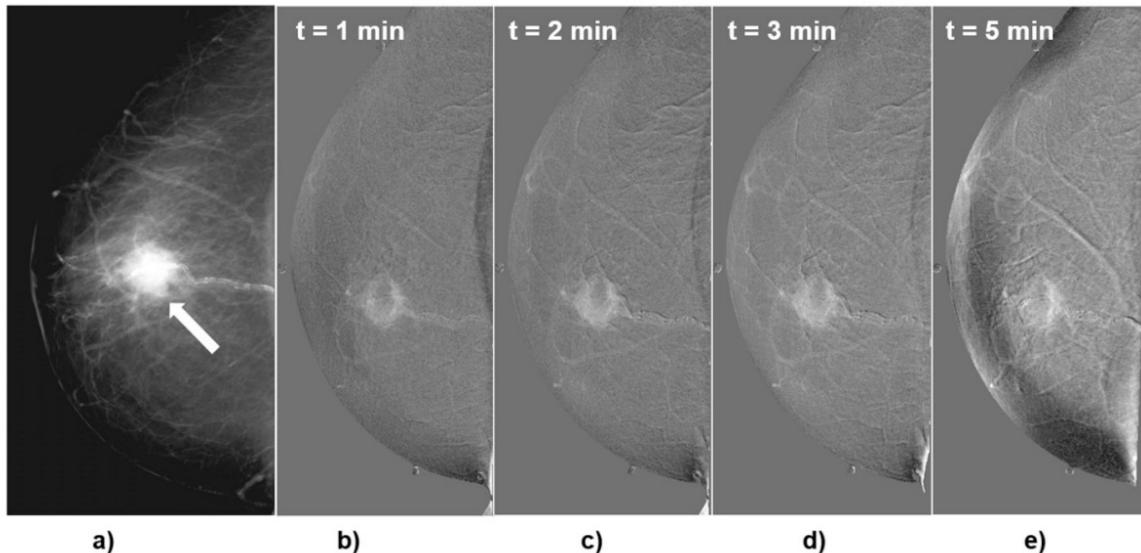


Figura 4. Imágenes de mamografía contrastada de una paciente con carcinoma ductal invasivo con necrosis. (a) mamografía convencional previa a la administración de medio de contraste (la flecha señala la lesión); (b-e) imágenes de mamografía contrastada obtenidas 1, 2, 3 y 5 minutos después de la inyección del medio de contraste. Las imágenes contrastadas muestran el contraste causado por la presencia de yodo en el borde de la lesión. De [7].

Un ejemplo notable del uso de las propiedades de la interacción de la RI son las mamografías, imágenes de rayos-x de la glándula mamaria, obtenidas para detectar y diagnosticar el cáncer de mama. En esta técnica, los rayos-x son de energías relativamente bajas (espectros con radiación efectiva, típicamente, entre 20 y 30 keV). Este intervalo permite que, por un lado, suficiente radiación atraviese el grosor de la mama humana comprimida (típicamente, entre 4 y 6 cm) y llegue con intensidad suficiente a un detector de imagen que registra el mapa de atenuaciones causado por el objeto. Por otro lado, las diferencias en el coeficiente de atenuación para el tejido fibroglandular y adiposo (los componentes principales de la glándula mamaria) a bajas energías permiten detectar en la imagen los sutiles cambios anatómicos del tejido mamario que indican una posible lesión. La modalidad conocida como mamografía contrastada utiliza un medio de contraste basado en yodo para enfatizar la presencia de lesiones posiblemente asociadas con un proceso maligno que ha iniciado la formación de nueva vasculatura. La técnica se basa en el énfasis causado en la imagen por la presencia del yodo debido a su alta probabilidad de efecto fotoeléctrico respecto del tejido mamario. La Figura 4 ilustra resultados clínicos de la técnica desarrollada por nuestro grupo de investigación [7].

La radioterapia con fotones se clasifica en dos grandes técnicas, teleterapia y braquiterapia, dependiendo de la distancia entre la fuente de radiación y la lesión. La teleterapia moderna usa haces de rayos-x generados por un acelerador lineal de electrones llamado linac. Los electrones son acelerados a energías entre 6 y 25 MeV, y los haces de rayos-x generados (radiación de frenado con un espectro continuo) tienen energías efectivas (o promedio) típicas de 2-8 MeV. El haz del linac irradia el blanco terapéutico (masa tumoral) desde el exterior del cuerpo (típicamente, a 100 cm) desde varias direcciones gracias a los movimientos de las componentes del acelerador, maximizando la dosis al blanco mientras se protege el tejido sano cercano. Las técnicas avanzadas combinan el giro del cabezal con la adaptación de colimadores que ajustan la forma del campo a la forma del tumor. Debido a sus energías, las interacciones de los fotones con las células del paciente son mayoritariamente por efecto Compton, y es la física de este efecto la que determina predominantemente la distribución de la dosis en el cuerpo del paciente. En braquiterapia, una fuente radiactiva sellada se localiza (temporal o permanentemente) cerca de la lesión y fotones de baja energía imparten su energía con gran intensidad en el tejido maligno debido a su cercanía espacial. Debido a las energías típicas de las fuentes de braquiterapia (entre 20 y 400 keV, aunque también se usan fuentes de rayos gamma más energéticos) los efectos fotoeléctrico y Compton son los dominantes.

## **CONCLUSIÓN**

Muchas de las técnicas avanzadas de la medicina actual se basan en el uso de radiación ionizante, fotones y partículas cargadas. El conocimiento de los procesos físicos originados en las interacciones entre la radiación y los átomos del tejido irradiado permite comprender el transporte de la radiación en el cuerpo, la atenuación, la transferencia y el depósito de energía, y optimizar las técnicas para lograr procedimientos efectivos y seguros. La especialización en física médica constituye un área de intenso e interesante desarrollo en la actualidad. En México existen oportunidades para que las y los interesados en aplicar la física en investigación y práctica profesional con impacto en salud obtengan la formación (educación y entrenamiento clínico) requerida [8].

## **AGRADECIMIENTO**

Se agradece el apoyo otorgado por DGAPA-UNAM a través del proyecto PAPIIT-IN105622.

## **REFERENCIAS**

1. ILO, International Labor Organization, <https://www.ilo.org/publications/international-standard-classification-occupations-2008-isco-08-structure> Visitado el 18 de Septiembre, 2024.
2. IAEA, Roles and Responsibilities, and Education and Training Requirements for Clinically Qualified Medical Physicists, HHS No. 25, IAEA, Vienna (2013).
3. EB Podgorsak, Radiation Physics for Medical Physicists, Springer, 2<sup>nd</sup> edition (2010) DOI 10.1007/978-3-642-008745-7
4. P Andreo, DT Burns, AE Nahum, J Seuntjens, FH Attix, Fundamentals of Ionizing Radiation Dosimetry (2017) Wiley-VCH, print ISBN 978-3-527-40921-1, Weinheim, Germany.
5. IAEA, Human Health Campus, Medical physics, <https://www.iaea.org/resources/hhc/medical-physics> . Visitado el 4 de Octubre 2024.
6. S Yun, S Kwok, Light in diagnosis, therapy and surgery. Nat Biomed Eng 1, 0008 (2017). <https://doi.org/10.1038/s41551-016-0008> Visitado el 19 de Septiembre 2024.
7. ME Brandan y colaboradores, Clinical study of contrast-enhanced digital mammography and the evaluation of blood and lymphatic microvessel density, Br J Radiol;89:20160232 (2016)
8. Maestría en Ciencias (Física Médica) UNAM, <https://www fisica.unam.mx/fismed> Visitado el 6 de Octubre 2024.

## **Excitones-Polaritones**

Iliana Carmona Moreno<sup>1,2</sup> and A. Camacho-Guardian<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México C.P. 04510, Mexico*  
<sup>2</sup>*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México C.P. 04510, Mexico*

Estas notas ofrecen una revisión teórica introductoria de excitones-polaritones de Frenkel. Los bloques de partida serán los fotones de cavidad y las excitaciones colectivas de semi-conductores orgánicos que en el régimen de acoplamiento fuerte dan lugar a entidades híbridas de luz-materia denominadas excitones-polaritones. Se revisarán las propiedades fundamentales de estas cuasi-partículas tanto en términos energéticos como su composición.

## I. INTRODUCCIÓN

Los excitones-polaritones son cuasipartículas fascinantes que surgen de la interacción fuerte entre excitones, que son pares electrón-hueco ligados en un semiconductor, y fotones, las partículas de luz [1–3]. Este acoplamiento ocurre dentro de una nanocavidad óptica, donde los fotones quedan atrapados y se acoplan fuertemente con los excitones, dando lugar a un estado híbrido que comparte propiedades tanto de la materia como de la luz.

En los últimos años, los excitones-polaritones han captado la atención de la comunidad científica debido a su carácter híbrido, lo cual le transfiere a estas cuasipartículas la capacidad de interactuar fuertemente a través de sus componentes de materia, dando lugar a la realización de estados exóticos de luz y materia como condensación de Bose-Einstein [4–7], resonancias de Feshbach [8–12], polaritones cargados [13–16], transporte de excitaciones ópticas neutras con campos eléctricos [17, 18], moléculas polaríticas, entre otros fenómenos, que típicamente uno asocia a la materia. Por otro lado, estas cuasipartículas heredan la masa ultra-liviana de los fotones de cavidad y su coherencia. Los excitones-polaritones entonces han atraído el interés por su naturaleza exótica, pero también por posibles aplicaciones opto-electrónicas que explotan a la par la naturaleza híbrida de luz-materia de los polaritones.

En estas notas revisaremos los elementos teóricos básicos de los excitones-polaritones en el contexto de excitones de Frenkel. Las notas están estructuradas de la siguiente manera. En la primera sección Sec.II revisaremos el Hamiltoniano de fotones confinados en una nanocavidad y su relación de dispersión. En la Sec.III estudiaremos el acoplamiento luz-materia en términos de la interacción entre fotones de cavidad y moléculas con una estructura interna de dos niveles; usaremos la transformación de Holstein-Primakoff para describir al sistema en términos de excitones y fotones. Posteriormente, en la Sec. IV describiremos al sistema en término de excitones-polaritones, los modos normales del Hamiltoniano.

## II. FOTONES DE CAVIDAD

Nuestro punto de partida es el Hamiltoniano en segunda cuantización del campo electromagnético,

$$\hat{H}_{\text{luz}} = \sum_{\vec{p}} \omega_c(\vec{p}) \hat{\gamma}_{\vec{p}}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{p}}, \quad (1)$$

escrito en términos de los operadores de creación y aniquilación  $\hat{\gamma}_{\vec{p}}^\dagger / \hat{\gamma}_{\vec{p}}$  para el modo  $\mathbf{p}$  (por simplicidad trabajaremos con una polarización dada y se omitirá en la notación). La energía  $\omega_c(\vec{p})$  depende del confinamiento del campo electromagnético. En nuestro caso, consideraremos luz confinada en una cavidad como se ilustra en Fig. 1. La cavidad consiste de dos espejos que asumiremos infinitos separados por una distancia  $L_z$ .

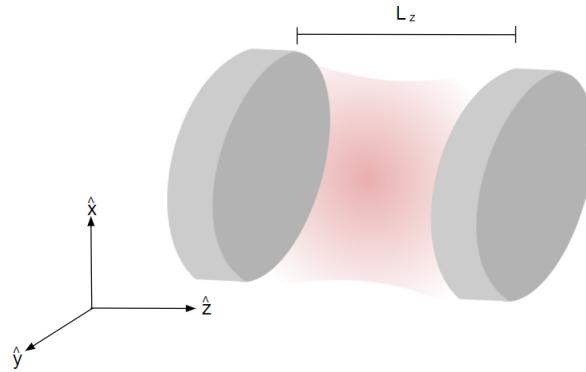


FIG. 1. Nanocavidad. Dos espejos infinitos separados una distancia  $L_z$  confinan el campo electromagnético en su interior (región rosa).

La relación de dispersión de la luz

$$\omega_c(\vec{p}) = \frac{c}{n} p = \frac{c}{n} \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}$$

El confinamiento en la dirección  $z$  impone que el modo en la dirección esté cuantizado, esto es,

$$p_z = \frac{m\pi}{L_z} \quad (2)$$

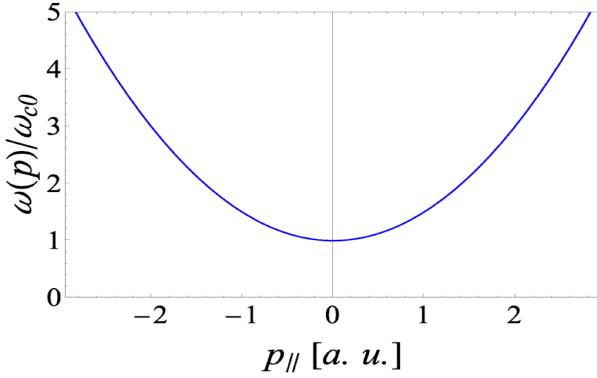


FIG. 2. Dispersion de la luz como función de  $p_{\parallel}$  para el primer modo fundamental  $n = 1$ .

con  $m = 1, 2, 3, \dots$  y  $n$  el índice de refracción del medio. Por otro lado, al considerar espejos infinitos, es decir, asumiendo  $L_x, L_y \gg L_z$ , los modos  $p_x$  y  $p_y$  se asumen continuos. De forma más rigurosa, podemos estimar esta aproximación. Si consideramos que el confinamiento en las direcciones  $x$  y  $y$  también es de una partícula en una caja, con condiciones periódicas a la frontera, podemos hacer un estimado de los valores permitidos de  $p_x$ ,  $p_y$  y de la diferencia entre estados adyacentes  $\Delta p_x = \frac{\pi}{L_x}$ . Dado que las dimensiones típicas de una nanocavidad son de  $L_z \sim 100 - 200$  nm, mientras que la extensión de la cavidad en las direcciones  $x$ ,  $y$  es del orden de un par de centímetros  $L_x, L_y \sim 1$  cm. Tomando el cociente

$$\frac{\Delta p_z}{\Delta p_x} = \frac{200 \times 10^{-9}}{10^{-2}} \approx 10^{-5}$$

se obtiene que los modos en  $p_x$  y  $p_y$  están mucho más "pegados" y se puede considerar que forman un continuo.

Para el modo fundamental  $m = 1$  obtenemos la relación de dispersión

$$\omega_c(\vec{p}) = \frac{c}{n} \sqrt{p_{\parallel}^2 + \left(\frac{m\pi}{L_z}\right)^2}, \quad (3)$$

donde  $p_{\parallel}^2 = p_x^2 + p_y^2$ . Es conveniente introducir  $\omega_{c0} = \frac{c\pi}{nL_z}$ , lo cual permite escribir a la relación de dispersión de los fotones de cavidad como

$$\omega_c(\vec{p}) = \sqrt{\frac{c^2}{n^2} p_{\parallel}^2 + \omega_{c0}^2} = \omega_{c0} \left(1 + \frac{c^2 p_{\parallel}^2}{\omega_{c0}^2 n^2}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4)$$

expresión que para momentos pequeños se aproxima a

$$\omega_c(\vec{p}) \approx \omega_{c0} + \frac{1}{2} \frac{c^2}{n^2 \omega_{c0}^2} p_{\parallel}^2 = \omega_{c0} + \frac{p_{\parallel}^2}{2m_c}, \quad (5)$$

donde

$$m_c = \frac{\omega_{c0} n^2}{c^2} \quad (6)$$

introduce a la masa del fotón de cavidad. Es importante destacar que ésta no es una masa inercial, sino una masa efectiva. La dispersión de la luz en función de  $p_{\parallel}$  es parabólica, como se ilustra en la Figura 2.

Es importante conectar la relación de dispersión con el ángulo de incidencia de la luz sobre la cavidad. Para ello notamos que  $p_{\parallel} = p \sin(\phi)$ ,

$$\omega_c(\vec{p}) = \frac{c}{n} \sqrt{p^2 \sin^2(\phi) + \left(\frac{m\pi}{L_z}\right)^2} = \sqrt{\omega_{c0}^2 + \omega_c^2(\phi) \frac{\sin^2(\phi)}{n^2}} \quad (7)$$

entonces,

$$\omega_c^2(\theta) = \omega_{c0}^2 + \omega_c^2(\phi) \frac{\sin^2(\phi)}{n^2},$$

despejando  $\omega_c(\phi)$  obtenemos la relación de dispersión de los fotones de cavidad como función del ángulo de incidencia

$$\omega_c(\phi) = \frac{\omega_{c0}}{\sqrt{1 - \left(\frac{\sin(\phi)}{n}\right)^2}}. \quad (8)$$

### III. ACOPLAMIENTO LUZ-MATERIA

Ahora estudiemos el acoplamiento de las excitaciones de la materia a los fotones de cavidad (ver Fig. 3 (izquierda)). Para ello, consideraremos un sistema de  $N$  moléculas cuyos grados de libertad relevantes pueden ser modelados como un sistema de dos niveles. Esto es que cada molécula puede estar en su estado base o en un estado excitado.

El Hamiltoniano que describe la parte de las excitaciones de la molécula es

$$\hat{H}_{\text{moleculas}} = \sum_{j=1}^N \omega_X \hat{\sigma}_j^\dagger \hat{\sigma}_j \quad (9)$$

donde  $\hat{\sigma}_j^\dagger$  es el operador que promueve a la molécula de su estado base al estado excitado, cuya energía es  $\omega_X$ .

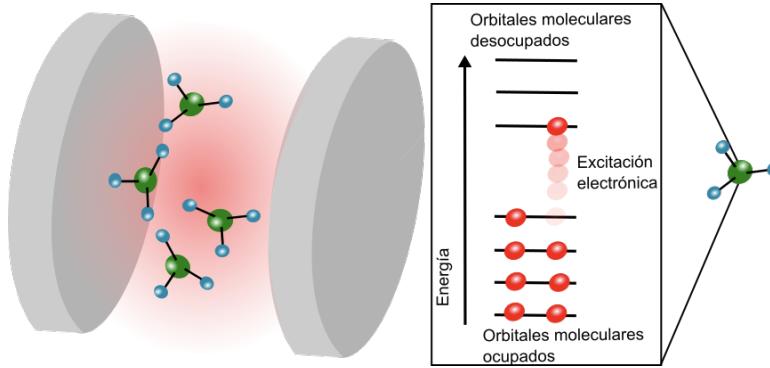


FIG. 3. (Izquierda) Cavidad nanométrica acoplada a moléculas orgánicas. (Derecha) Estructura electrónica típica de un semiconductor orgánico.

A la derecha de la Fig. 3, se muestra la estructura de los orbitales de una molécula semiconductora típica usada en los experimentos con moléculas orgánicas. Se dicen semiconductores orgánicos pues forman una estructura de bandas donde los electrones llenan los orbitales moleculares de energía más baja, y las transiciones electrónicas ocurren bajo un costo energético, que denominamos la energía de la excitación  $\omega_X$ , que se conoce como excitón.

Por otro lado, el acoplamiento de la luz-con las moléculas está dado por

$$\hat{H}_{\text{luz-materia}} = g \sum_{\vec{k}, j} (\hat{\sigma}_j^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} + \hat{\gamma}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\sigma}_j e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j}) \quad (10)$$

El primer término describe la absorción de un fotón para excitar una molécula del sistema, mientras que el segundo término corresponde a la emisión de un fotón debido al decaimiento del estado excitado de una molécula a su estado base.

En estas notas no entraremos en detalles de la parte disipativa del sistema, pero consideraremos que los ciclos de absorción y emisión de fotones dentro de la cavidad, en el cual las moléculas se excitan y desexcitan, ocurren múltiples veces antes que el fotón logre escapar de la cavidad. A este régimen se le conoce como de acoplamiento fuerte. Cuando los fotones escapan de la cavidad antes de que ocurran estos ciclos de absorción-emisión se le conoce como régimen de acoplamiento débil, como se ilustra en la Fig. 4(a). Dentro del acoplamiento fuerte, los procesos de emisión y absorción de fotones ocurren cientos de miles de veces antes de que el fotón escape de la cavidad, como se muestra en la Fig. 4(b).

Es conveniente introducir los operadores  $\hat{\sigma}_{\vec{k}}^\dagger$  donde  $\vec{k}$  es un vector en el espacio recíproco,

$$\hat{\sigma}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{u}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} \hat{\sigma}_{\vec{k}}^\dagger, \quad (11)$$

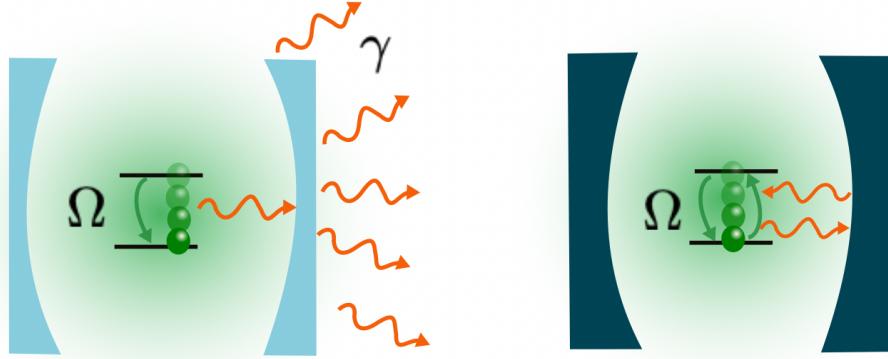


FIG. 4. (a) **Acoplamiento débil.** Los fotones escapan de la cavidad antes de que ocurran ciclos de emisión-absorción impidiendo el acoplamiento entre los fotones y las excitaciones de la materia. (b) **Acoplamiento fuerte.** Ciclos de emisión-absorción ocurren de forma eficiente dentro de la cavidad, permitiendo la hibridación de la luz con la materia.

En términos de estos operadores, el acoplamiento luz-materia se escribe como

$$\hat{H}_{\text{luz-materia}} = g\sqrt{N} \sum_{\vec{k}} \left[ \hat{\sigma}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}} + \hat{\gamma}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\sigma}_{\vec{k}} \right]. \quad (12)$$

Para describir al sistema en términos de sus excitaciones elementales es conveniente introducir los operadores bosónicos  $\hat{x}_j$  y  $\hat{x}_j^\dagger$  definidos de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_j &= \sqrt{(1 - \hat{x}_j^\dagger \hat{x}_j)} \hat{x}_j, \\ \hat{\sigma}_j^\dagger &= \hat{x}_j^\dagger \sqrt{(1 - \hat{x}_j^\dagger \hat{x}_j)}, \end{aligned} \quad (13)$$

lo que permite hacer un desarrollo perturbativo asumiendo que  $\langle \hat{x}_j^\dagger \hat{x}_j \rangle \ll 1$  es un parámetro pequeño. A primer orden, la aproximación es

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_j &\approx \hat{x}_j, \\ \hat{\sigma}_j^\dagger &\approx \hat{x}_j^\dagger. \end{aligned} \quad (14)$$

Esto re-escribe al acoplamiento luz-materia en términos sólo de operadores bosónicos de luz (fotones) y de las excitaciones de las moléculas

$$\hat{H}_{\text{luz-materia}} = g\sqrt{N} \sum_{\vec{k}} \left[ \hat{x}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}} + \hat{\gamma}_{\vec{k}}^\dagger \hat{x}_{\vec{k}} \right], \quad (15)$$

A estos operadores  $\hat{x}_{\vec{k}}, \hat{x}_{\vec{k}}^\dagger$  se dice que crean **excitones**, las quasi-partículas que describen efectivamente las excitaciones colectivas de las moléculas.

Cabe recalcar que aunque el acoplamiento de un fotón con una sola molécula es  $g$ , el acoplamiento de un fotón con los excitones escala como  $g\sqrt{N}$ , debido al acoplamiento colectivo de estas excitaciones con la luz. Es convención introducir el acoplamiento de Rabi  $\Omega = g\sqrt{N}$ .

#### IV. EXCITONES-POLARITONES

El Hamiltoniano que incorpora a los fotones de cavidad, las excitaciones colectivas de las moléculas y el acoplamiento luz-materia es

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\vec{k}} \left[ \omega_c(\vec{k}) \hat{\gamma}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}} + \omega_x \hat{x}_{\vec{k}}^\dagger \hat{x}_{\vec{k}} \right] + \Omega \sum_{\vec{k}} \left[ \hat{x}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}} + \hat{\gamma}_{\vec{k}}^\dagger \hat{x}_{\vec{k}} \right] \\ &= \sum_{\vec{k}} \begin{bmatrix} \hat{\gamma}_{\vec{k}}^\dagger & \hat{x}_{\vec{k}}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_c(\vec{k}) & \Omega \\ \Omega & \omega_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\gamma}_{\vec{k}} \\ \hat{x}_{\vec{k}} \end{bmatrix},\end{aligned}\quad (16)$$

Este Hamiltoniano está escrito en término de los operadores de creación y aniquilación de excitones  $\hat{x}_{\vec{k}}$  y  $\hat{x}_{\vec{k}}^\dagger$ . Para encontrar los modos fundamentales de este Hamiltoniano es necesario cambiar de base, a aquella en la cual el Hamiltoniano se vea diagonal. Denotando a los operadores de aniquilación en esta base por  $\hat{U}_{\vec{k}}$  y  $\hat{L}_{\vec{k}}$ ,

$$\begin{bmatrix} \hat{U}_{\vec{k}} \\ \hat{L}_{\vec{k}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\gamma}_{\vec{k}} \\ \hat{x}_{\vec{k}} \end{bmatrix},$$

que resultan de una rotación de los operadores originales. En esta base el Hamiltoniano es diagonal y por tanto tiene la siguiente estructura

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \begin{bmatrix} \hat{U}_{\vec{k}}^\dagger & \hat{L}_{\vec{k}}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_{\text{UP}}(\vec{k}) & 0 \\ 0 & \omega_{\text{LP}}(\vec{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{U}_{\vec{k}} \\ \hat{L}_{\vec{k}} \end{bmatrix},\quad (17)$$

donde  $\omega_{\text{UP/LP}}(\vec{k})$  son las energías propias del sistema. En esta base, el Hamiltoniano se escribe simplemente como

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \left[ \omega_{\text{UP}}(\vec{k}) \hat{n}_{\text{UP}}(\vec{k}) + \omega_{\text{LP}}(\vec{k}) \hat{n}_{\text{LP}}(\vec{k}) \right],\quad (18)$$

en términos de los operadores de número  $\hat{n}_{\text{UP}}(\vec{k}) = \hat{U}_{\vec{k}}^\dagger \hat{U}_{\vec{k}}$  y  $\hat{n}_{\text{LP}}(\vec{k}) = \hat{L}_{\vec{k}}^\dagger \hat{L}_{\vec{k}}$ . Los modos normales del sistema son los eigenvalores de la matriz Hamiltoniana, que pueden ser obtenidos simplemente de resolver

$$\det \begin{bmatrix} E - \omega_c(\vec{k}) & -\Omega \\ -\Omega & E - \omega_X \end{bmatrix} = 0,\quad (19)$$

lo que resulta en una ecuación cuadrática cuyas soluciones son

$$\omega_{\text{LP/UP}}(\vec{k}) = \frac{1}{2} \left( \omega_c(\vec{k}) + \omega_X \pm \sqrt{(\omega_c(\vec{k}) - \omega_X)^2 + 4\Omega^2} \right),\quad (20)$$

Por otro lado, los coeficientes de la transformación son

$$\cos^2 \theta = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\omega_c(\vec{k}) - \omega_X}{\sqrt{(\omega_c(\vec{k}) - \omega_X)^2 + 4\Omega^2}} \right),\quad (21)$$

y  $\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$ .

A los modos normales del Hamiltoniano se les conoce como **excitones-polariton**. Estas entidades, conocidas como cuasi-partículas, surgen del acoplamiento fuerte de la luz con la materia y son estados de superposición cuántica de fotones y excitones. A la rama superior, con mayor energía, se le suele denominar *upper polariton*, mientras a la rama inferior se le conoce como *lower polariton*. Para entender la naturaleza de estas cuaspartículas empecemos estudiando la energía de los polaritonos.

Primero estudiemos el caso de incidencia normal, esto es a  $\vec{k} = 0$ . Para ello es conveniente introducir la desintonía, definida como  $\delta(\vec{k}) = \omega_c(\vec{k}) - \omega_X$ . Típicamente, la energía de los excitones está fija por la naturaleza intrínseca de las moléculas, mientras la energía de la cavidad a incidencia normal puede ser sintonizada cambiando la longitud de la cavidad. Entonces, en nuestro caso, consideramos fija  $\omega_X$  y el parámetro libre es  $\omega_c(0)$ . La Fig. 5 muestra la energía

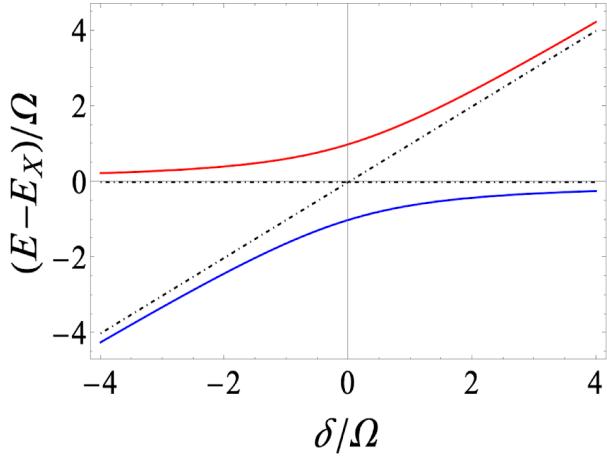


FIG. 5. Ramas polaritónicas a incidencia normal. La rama roja corresponde a  $\omega_{UP}(k=0)$  y la azul a  $\omega_{LP}(k=0)$ . Las líneas negras punteadas corresponden a las energías de los excitones (línea horizontal) y de los fotones de cavidad en ausencia de acoplamiento luz-materia.

de los polaritoness superior (línea roja) y polaritón inferior como función de la desintonía. Las líneas negras punteadas corresponden a las energías del excitón  $\omega_X$  y del fotón de cavidad  $\omega_c(\vec{0})$  como función de la desintonía.

A diferencia de las energías  $\omega_X$  y  $\omega_c(\vec{0})$  que se intersectan en el origen, observamos que aparece un cruce evitado, donde las ramas polaritónicas se repelen; la distancia mínima de separación entre estas ramas ocurre en  $\delta = 0$ , y es  $\omega_{UP}(\vec{0}) - \omega_{LP}(\vec{0}) = 2\Omega$ . A desintonías muy negativas o positivas, esto es para  $|\delta| \gg 2\Omega$ , las ramas polaritónicas tienden a los estados de excitón y fotón desacoplado.

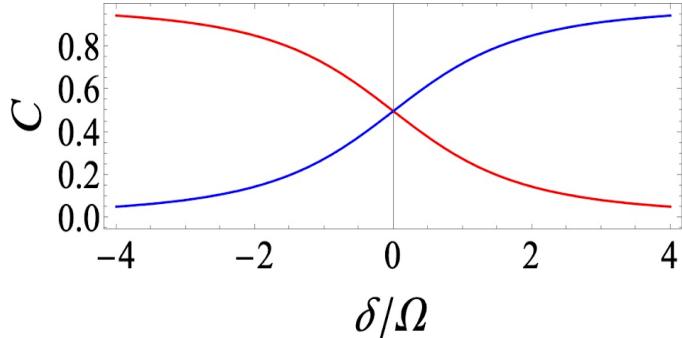


FIG. 6. Coeficientes de transformación. En azul  $\cos^2 \theta$  y en rojo  $\sin^2 \theta$ . A desintonías grandes  $|\delta|/\Omega \gg 1$  el sistema se desacopla y los coeficientes de Hopfield tienden a cero o a uno. Por otro lado, para  $\delta = 0$ , el acoplamiento luz-materia es máximo y los polaritoness están formados por mitad materia-mitad luz.

Estos resultados se pueden interpretar mejor si analizamos los coeficientes de la transformación. En este caso, por simplicidad, graficamos  $\cos^2 \theta$  (línea azul) y  $\sin^2 \theta$  (línea roja) en la Fig. 6. Vemos que en el caso extremo  $|\delta| \gg 2\Omega$  los coeficientes de la transformación tienden a 1 ó a 0. Esto quiere decir que en este límite los excitones y los fotones no se hibridizan. En este caso para desintonías negativas se tiene que  $\hat{L}_{\vec{0}} \sim \hat{\gamma}_{\vec{0}}$  y  $\hat{U}_{\vec{0}} \sim \hat{x}_{\vec{0}}$ ; mientras que para desintonías positivas  $\hat{L}_{\vec{0}} \sim \hat{x}_{\vec{0}}$  y  $\hat{U}_{\vec{0}} \sim \hat{\gamma}_{\vec{0}}$ .

Por otro lado, en resonancia, esto es cuando  $\delta = 0$ , el acoplamiento entre la luz y materia es más eficiente y los estados polaritónicos son una mezcla balanceada de un fotón de cavidad y un excitón. En este caso tenemos que

$$\begin{aligned}\hat{U}_{\vec{0}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\gamma}_{\vec{0}} - \hat{x}_{\vec{0}}) \\ \hat{L}_{\vec{0}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\gamma}_{\vec{0}} + \hat{x}_{\vec{0}})\end{aligned}\tag{22}$$

esto es, tanto el polaritón superior como inferior son mitad fotón y mitad excitón, en superposición lineal.

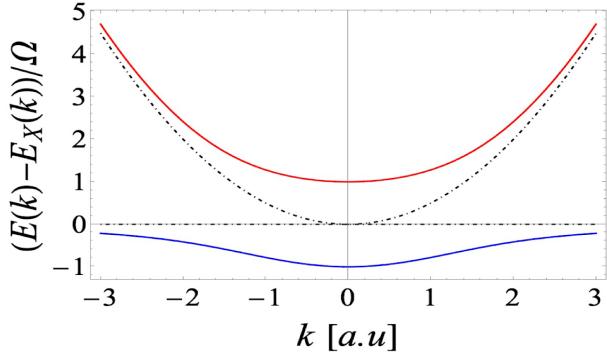


FIG. 7. Rama roja representa al polaritón superior  $\omega_{\text{UP}}(k)$ , mientras que el polaritón inferior  $\omega_{\text{LP}}(k)$  corresponde a la rama azul.

Finalmente, estudiemos la relación de dispersión de los polaritonos como función de  $k$ . Para ello, consideremos el caso  $\delta(\vec{0}) = 0$ . En este caso, las relaciones de dispersión de los estados de fotón y excitón se intersectan en  $k = 0$ , como se muestra en la Fig. 7. Por otro lado, los estados polaritonicos a  $k = 0$  están separados por una distancia  $2\Omega$ , siendo  $\omega_{\text{UP/LP}}(\vec{0}) = \mp\Omega$ . Por otro lado, tanto el polaritón superior como el inferior muestran un carácter dispersivo como función de  $k$ . Cabe resaltar que para momentos grandes el polaritón superior tiende a la energía del fotón de la cavidad mientras el polaritón inferior tiende a la energía del excitón. Esto es, a momentos grandes, los excitones se desacoplan de la luz. En términos energéticos, los fotones y excitones se desacoplan cuando  $k^2/2m_c \gg 2\Omega$ .

Sin embargo, para  $k^2/2m_c < 2\Omega$ , excitones y fotones se acoplan eficientemente, y los polaritonos adquieren el carácter dispersivo de la luz. La masa efectiva de ambas ramas polaritonicas es a momento cero

$$m_{\text{UP/LP}} = 2m_c \quad (23)$$

donde

$$m_{\text{UP/LP}}^{-1} = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{d^2\omega_{\text{UP/LP}}(\vec{k})}{dk^2}.$$

Esto enfatiza que ambas ramas polaritonicas heredan la masa ultra-liviana de los fotones.

## V. CONCLUSIONES

Hemos abordado los fundamentos teóricos esenciales para comprender de manera general a los excitones-polaritonos de Frenkel. En primer lugar, estudiamos los fotones de cavidad y su relación de dispersión y su dependencia con el ángulo de incidencia de la luz. Posteriormente, analizamos los excitones formados por transiciones electrónicas en semiconductores orgánicos, considerando un sistema de dos niveles. También vimos que el acoplamiento luz-materia ocurre únicamente en el régimen de acoplamiento fuerte, descrito por la absorción y emisión de fotones, lo que provoca la excitación o el decayamiento de la molécula del sistema, respectivamente. Finalmente, investigamos los excitones-polaritonos, modos normales del hamiltoniano que incluye tres términos clave: los fotones de cavidad, las excitaciones colectivas y el acoplamiento luz-materia. De este análisis surgieron dos ramas, de mayor y menor energía, conocidas como polaritón superior e inferior, respectivamente. A partir de aquí, examinamos diferentes casos para comprender su naturaleza, como los casos límite, la incidencia normal, la condición de resonancia y su comportamiento en función del momento.

Estas cuasipartículas han adquirido gran relevancia debido a sus propiedades híbridas de luz y materia, como su masa ultraligera, sus características no lineales y su alta sensibilidad a estímulos externos. Los excitones-polaritonos tienen amplias aplicaciones, destacándose en los campos de la materia condensada y la óptica [19]. Los condensados de Bose-Einstein formados por polaritonos, que pueden generarse a temperatura ambiente, permiten simular sistemas reticulares específicos, como la simulación de un aislante topológico [20]. Además, es posible desarrollar diversos dispositivos basados en excitones-polaritonos, como transistores ópticos [21] o láseres [22]. De acuerdo a Ghosh et al. (2022), el estudio de estas cuasipartículas promete un futuro con grandes avances, aunque con retos importantes, como la observación de efectos cuánticos a temperatura ambiente y la construcción de dispositivos cuánticos basados en polaritonos.

## VI. AGRADECIMIENTOS

A. C. G. agradece el apoyo de Grant UNAM DGAPA PAPIIT No. IA101923, PAPIME No. PE100924 y PIIF 2023.

- 
- [1] JJ Hopfield, “Theory of the contribution of excitons to the complex dielectric constant of crystals,” *Physical Review* **112**, 1555 (1958).
  - [2] JJ Hopfield, “Resonant scattering of polaritons as composite particles,” *Physical Review* **182**, 945 (1969).
  - [3] JJ Hopfield, “Aspects of polaritons,” in *Confined Electrons and Photons: New Physics and Applications* (Springer, 1966) pp. 771–782.
  - [4] Tim Byrnes, Na Young Kim, and Yoshihisa Yamamoto, “Exciton–polariton condensates,” *Nature Physics* **10**, 803–813 (2014).
  - [5] Jonathan Keeling and Natalia G Berloff, “Exciton–polariton condensation,” *Contemporary Physics* **52**, 131–151 (2011).
  - [6] Hui Deng, Hartmut Haug, and Yoshihisa Yamamoto, “Exciton-polariton bose-einstein condensation,” *Reviews of modern physics* **82**, 1489–1537 (2010).
  - [7] Jacek Kasprzak, Murielle Richard, S Kundermann, A Baas, P Jeambrun, Jonathan Mark James Keeling, FM Marchetti, MH Szymańska, R André, JL Staelhli, *et al.*, “Bose–einstein condensation of exciton polaritons,” *Nature* **443**, 409–414 (2006).
  - [8] Naotomo Takemura, Stéphane Trebaol, Michiel Wouters, Marcia T Portella-Oberli, and Benoît Deveaud, “Polaritonic feshbach resonance,” *Nature Physics* **10**, 500–504 (2014).
  - [9] M Navadeh-Toupchi, N Takemura, MD Anderson, DY Oberli, and MT Portella-Oberli, “Polaritonic cross feshbach resonance,” *Physical review letters* **122**, 047402 (2019).
  - [10] W Casteels and M Wouters, “Polaron formation in the vicinity of a narrow feshbach resonance,” *Physical Review A* **90**, 043602 (2014).
  - [11] MA Bastarrachea-Magnani, A Camacho-Guardian, Michiel Wouters, and GM Bruun, “Strong interactions and biexcitons in a polariton mixture,” *Physical Review B* **100**, 195301 (2019).
  - [12] A Camacho-Guardian, MA Bastarrachea-Magnani, and GM Bruun, “Mediated interactions and photon bound states in an exciton-polariton mixture,” *Physical Review Letters* **126**, 017401 (2021).
  - [13] Meinrad Sidler, Patrick Back, Ovidiu Cotlet, Ajit Srivastava, Thomas Fink, Martin Kroner, Eugene Demler, and Atac Imamoglu, “Fermi polaron-polaritons in charge-tunable atomically thin semiconductors,” *Nature Physics* **13**, 255–261 (2017).
  - [14] Li Bing Tan, Ovidiu Cotlet, Andrea Bergschneider, Richard Schmidt, Patrick Back, Yuya Shimazaki, Martin Kroner, and Ataç İmamoğlu, “Interacting polaron-polaritons,” *Physical Review X* **10**, 021011 (2020).
  - [15] Aleksi Julku, Miguel A Bastarrachea-Magnani, Arturo Camacho-Guardian, and Georg M Bruun, “Nonlinear optical response of resonantly driven polaron-polaritons,” *Physical Review B* **104**, L161301 (2021).
  - [16] Sangeet S Kumar, Brendan C Mulkerin, Meera M Parish, and Jesper Levinsen, “Trion resonance in polariton-electron scattering,” *Physical Review B* **108**, 125416 (2023).
  - [17] Ovidiu Cotlet, Falko Pientka, Richard Schmidt, Gergely Zarand, Eugene Demler, and Atac Imamoglu, “Transport of neutral optical excitations using electric fields,” *Phys. Rev. X* **9**, 041019 (2019).
  - [18] T. Chervy, P. Knüppel, H. Abbaspour, M. Lupatini, S. Fält, W. Wegscheider, M. Kroner, and A. Imamoglu, “Accelerating polaritons with external electric and magnetic fields,” *Phys. Rev. X* **10**, 011040 (2020).
  - [19] Sanjib Ghosh, Rui Su, Jiaxin Zhao, Antonio Fieramosca, Jinqi Wu, Tengfei Li, Qing Zhang, Feng Li, Zhanhai Chen, Timothy Liew, Daniele Sanvitto, and Qihua Xiong, “Microcavity exciton polaritons at room temperature,” *Photonics Insights* **1**, 0 (2022).
  - [20] S. Klembt, T. H. Harder, O. A. Egorov, K. Winkler, R. Ge, M. A. Bandres, M. Emmerling, L. Worschech, T. C. H. Liew, M. Segev, C. Schneider, and S. Höfling, “Exciton-polariton topological insulator,” *Nature* **562**, 552–556 (2018).
  - [21] Anton V. Zasedatelev, Anton V. Baranikov, Darius Urbonas, Fabio Scafirimuto, Ullrich Scherf, Thilo Stáferle, Rainer F. Mahrt, and Pavlos G. Lagoudakis, “A room-temperature organic polariton transistor,” *Nature Photonics* **13**, 378–383 (2019).
  - [22] A. Imamoglu, R. J. Ram, S. Pau, and Y. Yamamoto, “Nonequilibrium condensates and lasers without inversion: Exciton-polariton lasers,” *Phys. Rev. A* **53**, 4250 (1996).

# **Construcción de levitadores acústicos de onda estacionaria empleando arreglos de transductores piezoelectricos ultrasónicos**

Kenia Zamora,<sup>1</sup> Alan Reyes,<sup>1,2</sup> Ruben D. Muelas-Hurtado,<sup>2</sup> and Victor Contreras\*<sup>2</sup>

<sup>1)</sup>*Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad s/n 62210, Cuernavaca, México.*

<sup>2)</sup>*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca 62210, México.*

(\*Electronic mail: [victor@icf.unam.mx](mailto:victor@icf.unam.mx))

Recientemente la levitación acústica ha tenido avances notorios y sus aplicaciones se han expandido a distintos campos científicos y tecnológicos gracias a la implementación de la tecnología de arreglos en fase. Este documento presenta una guía para la construcción de levitadores acústicos de onda estacionaria basada en arreglos de transductores piezoelectricos ultrasónicos y material electrónico de bajo costo. La guía está dirigida al sector académico interesado en utilizar levitadores acústicos en sus cursos e investigaciones a niveles de educación superior y de posgrado. La parte introductoria del documento presenta brevemente algunos conceptos básicos asociados a la levitación acústica y la tecnología empleada para la emisión de ultrasonido. La segunda parte del documento describe una serie de pasos necesarios para la construcción del levitador.

## I. INTRODUCCIÓN A LA LEVITACIÓN ACÚSTICA

Un levitador acústico es un dispositivo que utiliza sonido para suspender objetos en fluidos como el aire. En estos dispositivos, la levitación se logra a través de ondas acústicas que neutralizan la fuerza de gravedad que nuestro planeta ejerce en objetos de tamaños micrométricos y milimétricos con el fin de atraparlos en posiciones específicas. Esta tecnología comenzó a desarrollarse con fines prácticos a partir de los años 70 en el Jet Propulsion Laboratory de la NASA, donde se realizaron investigaciones sobre manipulación de objetos en ambientes de microgravedad.<sup>1</sup> La tecnología sigue en desarrollo y actualmente sus aplicaciones abarcan una amplia gama de temas que van desde la suspensión y manipulación de sustancias para producir reacciones químicas sin el uso de contenedores;<sup>2</sup> el estudio de propiedades físicas y químicas de líquidos;<sup>3-6</sup> o el desarrollo de pantallas 3D basadas en la holografía acústica.<sup>7</sup>

### A. Tipo de ondas empleadas

Los levitadores acústicos operan mediante presiones de radiación acústica asociadas a ondas de intensidades altas que pueden superar los 120 decibeles (dB). Para evitar daños auditivos, se utilizan ondas de frecuencias asociadas al rango ultrasónico debido a que no son perceptibles por el oído humano (Figura 1). El ultrasonido puede propagarse en el aire y su atenuación es proporcional a la frecuencia de las ondas.<sup>8</sup> Por ejemplo, el ultrasonido a 200 kHz se atenúa alrededor de 11 veces más que el ultrasonido a 20 kHz bajo condiciones atmosféricas estándar. Por esta razón, para aplicaciones de levitación acústica en aire, los levitadores se diseñan con ondas de baja frecuencia ultrasónica, generalmente en el rango de 25 – 100 kHz.<sup>9</sup>

### B. Método de levitación acústica

Existen distintos métodos de levitación acústica y se pueden clasificar de acuerdo con el campo de presión acústico que generan. Los métodos pueden ser de: (1) onda estacionaria, (2) campo cercano, (3) campo cercano invertido, (4) campo lejano y (5) campo de un solo haz.<sup>10</sup> Sin embargo, la generación de ondas estacionarias dentro de cavidades uniaxiales es el método de levitación acústica más común y explorado debido a su potencial científico y tecnológico. Los levitadores de onda estacionaria generalmente son cavidades de geometría uniaxial formadas por un emisor y un reflector -o dos emisores que operen a la misma frecuencia- donde las superficies que emiten

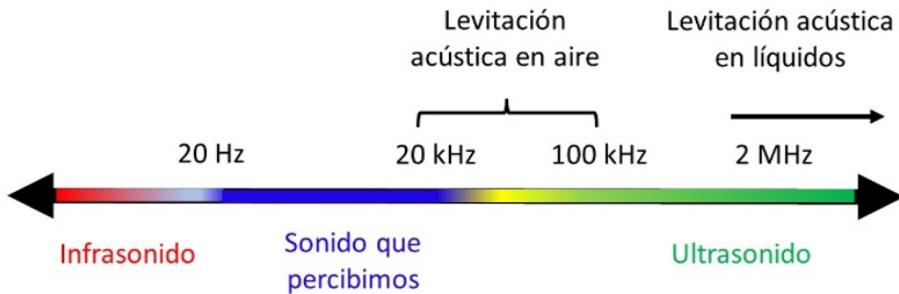


Figura 1. Ilustración de rangos de frecuencias de ondas acústicas. Para la levitación acústica en aire, generalmente se emplea el rango de 25 – 100 kHz.

y reflejan las ondas acústicas están separadas una distancia proporcional a la longitud de onda ultrasónica y a la geometría de las superficies emisoras y reflectoras.

### C. Ondas estacionarias en cavidades acústicas

Si las superficies de la cavidad son planas, como se ilustra en la Figura 2 (a), la onda estacionaria se forma si la longitud de la cavidad  $L$ , es un múltiplo entero  $n$ , de media longitud de onda  $L = n\lambda/2$  y es relativamente simple ajustar la longitud de la cavidad. El número  $n$  representa el modo longitudinal de la cavidad y está asociado a una distribución específica de onda estacionaria. Por ejemplo, el valor de  $n$  indica el número de antinodos de la onda estacionaria. En el caso de objetos pequeños comparados con la longitud de onda de la onda acústica, la levitación acústica ocurre en los nodos de la onda estacionaria. Si se construye un levitador con superficies emisoras y reflectoras cóncavas, el campo ultrasónico se enfoca y la presión acústica se concentra radialmente en el centro de la cavidad, como se ilustra en la Figura 1 (b). La configuración cóncava aumenta considerablemente la amplitud de presión en los antinodos centrales, aumentando el equilibrio espacial de los objetos levitados y la capacidad de levitación en términos del peso del objeto. Sin embargo, la longitud de cavidad requerida para producir ondas estacionarias con amplitudes máximas ya no es proporcional a  $\lambda/2$  y es más complejo ajustar la cavidad.

### D. Transductores ultrasónicos

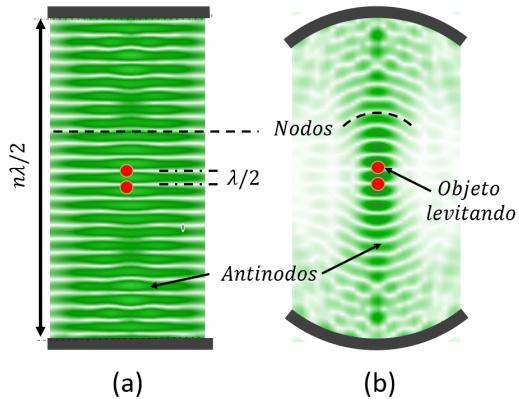


Figura 2. Ilustración 2D de ondas estacionarias producidas por cavidades con dos fronteras emisoras (a) planas y (b) esféricas. El color verde ilustra la presión acústica.

Es posible generar ultrasonido con diversas tecnologías; sin embargo, los levitadores acústicos de onda estacionaria comúnmente utilizan transductores piezoelectricos de alta potencia, conocidos como transductores Langevin (TL), como fuentes de emisión ultrasónica. Los TL operan con voltajes de hasta 1000 V y con potencias mayores a los 100 W,<sup>11</sup> y se han utilizado para fabricar levitadores capaces de levitar líquidos y sólidos de alta densidad<sup>12</sup>, ya que pueden producir fuerzas de atrapamiento del orden de 60-80 mN. Sin embargo, la tendencia de la última década es desarrollar levitadores acústicos que sustituyen los TL por arreglos de múltiples transductores ultrasónicos de baja potencia que se alimentan con voltajes pico menores a 20 Vp (Figura 3). Estos transductores ultrasónicos son construidos a partir de cerámicas piezoelectricas delgadas, acopladas a una hoja metálica, que vibran como respuesta a una deformación mecánica proporcional al voltaje y frecuencia de una señal eléctrica recibida; y viceversa, producen una señal eléctrica al recibir o detectar una vibración ultrasónica. La vibración es amplificada por un cono metálico acoplado a la hoja metálica pegada a la cerámica piezoelectrica y los dispositivos pueden emplearse como emisores y receptores ultrasónicos. Estos transductores son compactos y pueden ordenarse de múltiples formas para formar levitadores con mayores superficies radiantes y de geometrías más diversas si se comparan con la tecnología de transductores tipo Langevin. Otra ventaja de la tecnología de arreglos de transductores es que permite desarrollar levitadores capaces de manipular a los objetos levitados al transferirles movimiento translacional o rotacional mediante el control electrónico de la fase de los emisores.<sup>13</sup>

En 2017 se publicó en la literatura científica un levitador acústico conformado por una cavidad concéntrica uniaxial, llamada TinyLev, y conformada por dos arreglos de transductores contra-

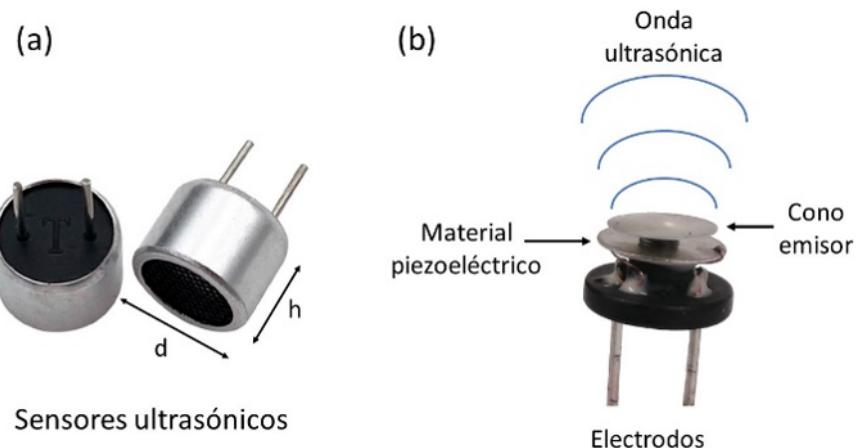


Figura 3. (a) Imágenes de transductores ultrasónicos de carcasa metálica de diámetro  $d = 10$  mm y altura  $h = 7$  mm. (Manorshi,MSO-A1040H07T). (b) Imagen del transductor sin la carcasa metálica. La onda ultrasónica se genera (y detecta) mediante el amplificador mecánico de forma cónica acoplado al disco formado por una placa de latón acoplada a un material piezoeléctrico.

puestos. En la publicación se describe el diseño y se caracteriza numérica y experimentalmente el desempeño del TinyLev, capaz de levitar en aire objetos con densidades de hasta 6.5 g/cm<sup>3</sup>. Además, el dispositivo se construye con tecnología simple y de bajo costo, haciéndolo accesible para múltiples aplicaciones, para actividades de investigación y para divulgación científica.

Esta guía se basa principalmente en las instrucciones descritas por el autor del TinyLev en la página web <https://www.instructables.com/Acoustic-Levitator/>, e incluye algunas modificaciones orientadas a mejorar el desempeño de los levitadores de onda estacionaria. Dichas modificaciones permiten, por ejemplo, construir cavidades con la capacidad de levitación del TinyLev utilizando el 50 % de los transductores del diseño original.

## E. Seguridad

Cada vez estamos más expuestos a ondas ultrasónicas en ambientes urbanos debido al incremento del uso de tecnologías en este rango de sonido como es el caso de alarmas, sensores de proximidad de automóviles, dispositivos médicos y dentales, etc. Por cuestiones de seguridad, existen guías estándar para regular la exposición al ultrasonido. Para el caso del ultrasonido aero-transportado de baja frecuencia, se recomienda no exceder niveles de presión sonora (SPL) de 145

dB (para 40 kHz) siempre y cuando no existan algún fluido o sustancia que pueda potencialmente acoplar la impedancia en aire a la del cuerpo humano.<sup>14</sup> Si existe la posibilidad de acople de impedancias mediante algún fluido presente en la atmósfera o el oído, este nivel máximo se reduce a 115 dB. Estudios recientes de exposición a emisión ultrasónica a frecuencias de 40 kHz y de intensidades mayores a 120 dB no han mostrado signos de afectación auditiva<sup>15</sup> ni cognitiva.<sup>16</sup>

Los transductores ultrasónicos empleados en sistemas de levitación acústica son dispositivos electrónicos “off-the-shelf” o de uso común y se consideran seguros ya que el SPL de un solo sensor es del orden de 115 dB de acuerdo con las especificaciones del fabricante. Sin embargo, esta situación es distinta cuando se emplean arreglos de transductores, sobre todo si se enfocan. Por ejemplo, si se emplean cientos de transductores de manera que enfoquen eficientemente la emisión ultrasónica, en conjunto pueden llegar a superar los 145 dB (SPL) en la zona de enfoque.<sup>15</sup>

En esta guía se proporcionan diseños de levitadores ultrasónicos que emplean un total de 40 transductores, y que pueden alcanzar presiones aproximadas de 164 dB en la zona de enfoque; por lo tanto, se recomienda no operarlos de manera independiente para evitar la interacción directa de las personas con la zona de enfoque. Opere a los arreglos solo como cavidad, la presión decae considerablemente al alejarse del foco. En general, sea responsable en el proceso de construcción de estos dispositivos y en su uso. Supervise en todo momento su funcionamiento cuando se exhiban o utilicen en presencia de niños y público en general.

## II. MATERIALES Y EQUIPOS

### A. Materiales

- Arduino nano.
- Placa de pruebas (Protoboard) 170p.
- Módulo L298n.
- Cables jumpers (hembra-macho, macho-macho).
- Cable- alambre de cobre 22AWG o 24AWG.
- Transductores 10mm-40 kHz.
- Sockets impresos en 3D.

- Soldadura y pasta para soldar.

## B. Equipos

- Osciloscopio.
- Generador de funciones.
- Cautín 30W.
- Caimanes.
- Pinzas.

## C. Equipos de protección

- Lentes de seguridad.
- Cubrebocas (para evitar aspirar vapores de soldadura).
- Auriculares aislantes de ruido.
- Extractor de humo de soldadura.

## III. SOPORTES 3D PARA ENSAMBLE DE TRANSDUCTORES

Las cavidades ultrasónicas uniaxiales requieren de dos superficies que dan soporte a los emisores. Estas superficies o soportes pueden fabricarse mediante impresión 3D en materiales como ABS, PLA u otros materiales de características mecánicas similares. Sus geometrías usuales son casquetes esféricos que varían de tamaño de acuerdo con el número de transductores utilizados y su empaquetamiento u ordenamiento; por ejemplo, el arreglo puede ser hexagonal<sup>17</sup> o en forma de anillos concéntricos.<sup>18</sup>

En la página web del [Laboratorio de óptica y acústica del ICF](#) encontrará los diseños para impresión 3D de los soportes cóncavos de geometría esférica y diseños de la estructura para determinar polaridad de trasductores.

## **A. Impresión de soportes 3D**

Si la impresora está calibrada, los transductores pueden ensamblarse a presión en los huecos de 10 mm del soporte de plástico sin necesidad de utilizar adhesivos. Si el diámetro de los agujeros es mayor al de los transductores, utilice algún adhesivo para pegarlos o enrolle un poco de cinta aislante alrededor de la carcasa para aumentar su diámetro y poder ensamblarlos a presión.

## **B. Preparación de soportes 3D**

Previo al montaje de los transductores, limpie los soportes 3D para remover los grumos sobrantes generados por la misma impresora. El objetivo es evitar bordes o imperfecciones en la base del transductor que modifiquen su posición o generen alguna inclinación que modifique la dirección de la señal ultrasónica emitida.

## **IV. SELECCIÓN DE TRANSDUCTORES**

Los transductores comerciales generalmente indican su polaridad; sin embargo, algunas ocasiones dicha polaridad está invertida y se recomienda verificarla si se desea construir un levitador que opere en óptimas condiciones. En caso de no contar con un osciloscopio siga las [instrucciones](#) de verificación de polaridad de A. Marzo y pasar a la sección VI de este documento.

Para generar una distribución de presión uniforme en la cavidad ultrasónica, es importante elegir transductores que emitan señales con amplitud y fase similares. Para obtener una medida relativa de la amplitud y de la fase de cada transductor que se va a utilizar para el levitador, construya un circuito de prueba utilizando dos transductores –un emisor y un receptor–, separándolos una distancia fija de manera que formen una cavidad plana. Siga las siguientes indicaciones:

### **A. Cavidad para medir amplitud y fase de transductores**

- Opción 1.

Fijar sobre una superficie plana la placa de pruebas (protoboard) y un soporte de sujeción de un transductor, asegurándose que queden fijas para que no cambien su posición durante el proceso y mantener el circuito de prueba bajo las mismas condiciones. En la protoboard se ubican los transductores emisores a los que se les medirá su amplitud y fase relativas. Para ello, se debe incrustar

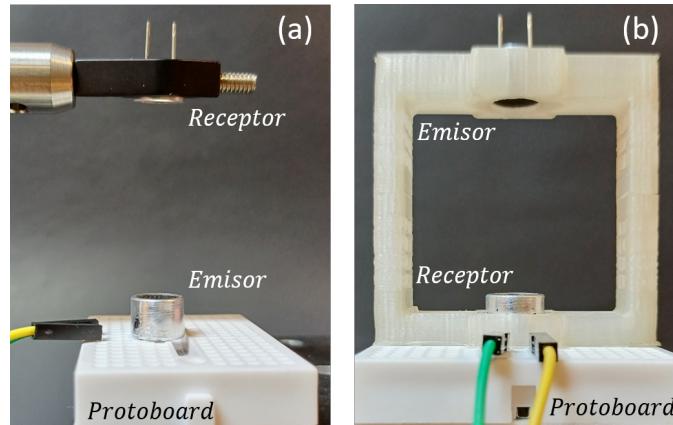


Figura 4. Colocación de transductores para verificación de polaridad. El arreglo consiste en una cavidad formada por un transductor emisor y un transductor receptor, separados una distancia múltiplo de media longitud de onda. (a) Opción 1. (b) Opción 2.

un transductor en la protoboard y conectar dos cables jumper macho-macho en las mismas líneas de continuidad que el transductor. En el soporte de sujeción se posiciona un segundo transductor, que funcionará como receptor, a  $\approx 5$  cm del transductor emisor. Se debe garantizar que los centros del emisor y receptor sean colineales, formando una cavidad con ambos transductores (Figura 4 (a)).

Colocar un conector BNC tipo T a uno de los canales del generador de funciones y conecte una de las salidas de la T al transductor emisor, y la otra salida a uno de los canales del osciloscopio (Figura 5). Esta conexión permite enviar una onda periódica al transductor emisor y observarla simultáneamente en el osciloscopio como señal de referencia. Conectar el transductor receptor a una de las salidas del cable BNC y la otra salida a uno de los canales del osciloscopio. Encender el osciloscopio y el generador de funciones. Configurar el generador de funciones para emitir una onda senoidal continua de 40kHz con amplitud de 5Vpp. Se pueden usar otras amplitudes menores o mayores de voltaje, sin embargo, tenga presente que este tipo de transductores comerciales suelen operar hasta un rango de voltaje de 20 Vp y la respuesta acústica lineal de estos se obtienen para voltajes menores a 8V<sub>p</sub>. Ajustar finamente la distancia de separación emisor-receptor de manera que maximice (esto pasa cada 9 mm aprox.) la lectura en amplitud en el canal 1 del osciloscopio.

Ajuste las ventanas de tiempo y amplitud del osciloscopio para poder visualizar al menos cinco ciclos de las ondas senoidales del emisor y receptor. En el canal 2 del osciloscopio observará la señal de referencia (emisor). Si ambas señales están en fase (Figura 6 (a)), marque una de las

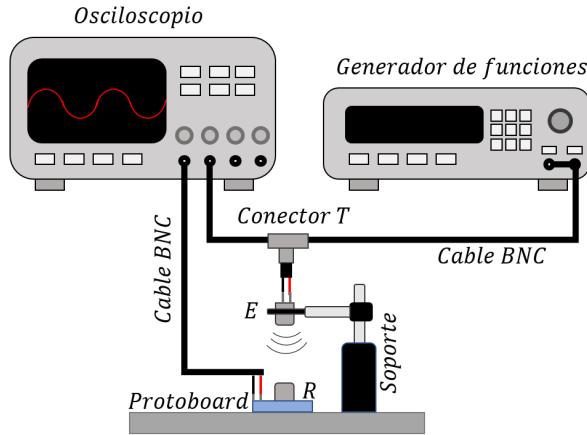


Figura 5. Conexiones eléctricas para verificar la polaridad de los transductores

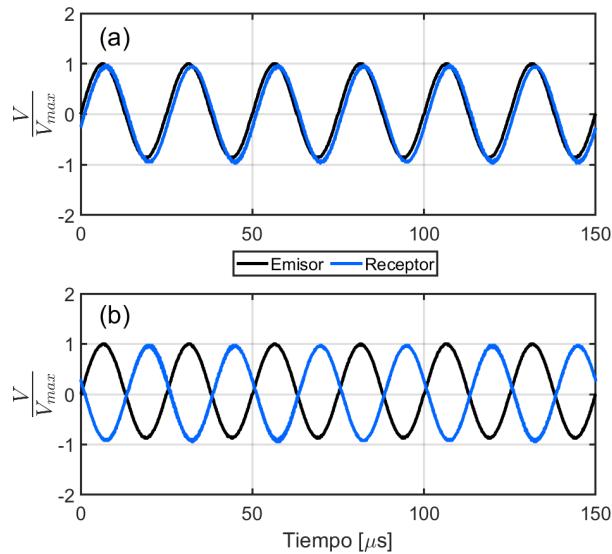


Figura 6. Forma de onda de las señales de voltaje eléctrico medidas en el emisor y receptor. (a) Señales en fase y (b) desfase cercano a  $180^\circ$ .

terminales del emisor, por ejemplo, la terminal conectada al positivo.

Intercambie el transductor emisor por cada uno de los transductores que desea verificar. Si algún transductor emisor está colocado con la polaridad invertida, la onda estará invertida  $180^\circ$  respecto a la onda del transductor emisor (Figura 6(b)).

Si la señal está invertida, marque la terminal contraria (negativa, siguiendo el ejemplo), o invierta la conexión del transductor para visualizar la fase correcta y marque la terminal positiva.

- Opción 2.

Imprimir el diseño proporcionado y montar los transductores de acuerdo con el diagrama ilustrado en la Figura 4 (b). Siga las instrucciones de conexión eléctrica desritas en la opción 1. Se recomienda montar la estructura sobre una protoboard para asegurar su estabilidad, manteniendo fijo al transductor receptor y garantizar la reproducibilidad en las mediciones para todos los transductores que se caracterizan. Es muy importante que el transductor receptor se mantenga fijo durante todo el proceso de medición y no cambie su posición. Un error de 0.5 mm entre la distancia de separación de los transductores equivale a un error de fase de 20°.

## B. Clasificación de transductores

Conforme a los datos adquiridos en el osciloscopio, clasifique los transductores considerando su amplitud ( $V_{pp}$ ) y su desfase respecto de la señal de referencia (fase relativa). Generalmente, las características de los transductores varían entre lotes de producción dependiendo de la marca, pero los transductores de un mismo lote/marca son similares. Un análisis estadístico es recomendable cuando se caracterizan cientos de transductores.<sup>19,20</sup>

Elegir los transductores con las características más parecidas posibles permitirá conformar una onda estacionaria más uniforme, y consecuentemente un levitador con una mejor capacidad de levitación.

## V. ENSAMBLE DE TRANSDUCTORES

- Coloque cada uno de los transductores en el casquete esférico, considerando la polaridad marcada en cada uno de los transductores de manera que le simplifique el proceso de soldar. Por ejemplo, coloque los transductores con la terminal (pin) positiva hacia el exterior como se ilustra en la Figura 7. Añadir un poco de pegamento en caso de que el transductor no quede fijo en el socket. El pegamento no debe dejar residuos o grumos que provoquen desalineación de los transductores.
- Proceda a soldar en paralelo a todos los transductores del arreglo empleando un cable alambre para todas las terminales positivas, y un cable para todas las terminales negativas, de manera que sólo queden dos cables por cada casquete esférico. Asegúrese que no haya ningún corto circuito.

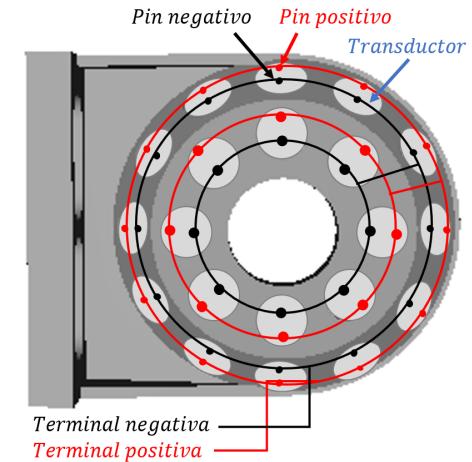


Figura 7. Vista exterior del casquete esférico con los transductores ensamblados y conectados a dos terminales eléctricas.

Arduino	Módulo L298n
A0	IN1
A1	IN2
A2	IN3
A3	IN4

Cuadro I. Conexión de pines entre el Arduino Nano y el módulo de puente H L298n

## VI. CONEXIONES DE LA ESTRUCTURA DEL LEVITADOR

- Conectar el Arduino a la computadora y cargar en el Arduino el código Levitador.ino obtenido de: <https://www.instructables.com/Acoustic-Levitizer/>. Recuerde que para cargar el código necesita tener instalado el Arduino IDE en la computadora. El software se puede descargar de <https://www.arduino.cc/en/software>.
- Conectar el pin D10 al D11 del Arduino.
- Conectar los pines del módulo de puente H L298n a los pines analógicos del Arduino como se indica en la Tabla I.
- Conectar el GND de Arduino al del módulo de puente H L298n.
- Conectar el pin de entrada/salida de +5V del módulo L298n a la entrada de voltaje (Vin) del

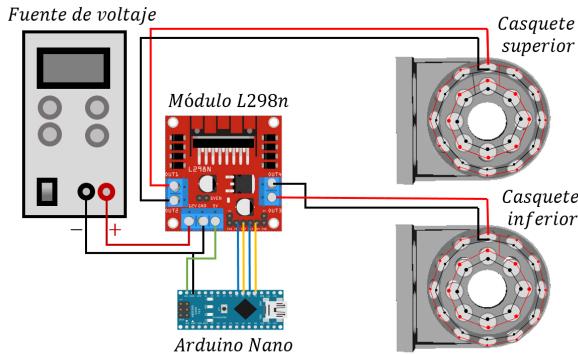


Figura 8. Diagrama de conexiones eléctricas del levitador acústico.

Arduino, esto será para alimentar el levitador con una sola fuente de alimentación. Asegúrese que el jumper regulador del módulo L298n esté activado (este jumper está cercano a los pines Vin y GND del módulo).

- Conectar los arreglos al módulo L298n de la siguiente forma: cables positivos al OUT1 y OUT3, y cables negativos a OUT2 y OUT4 (o viseversa: negativos al OUT1 y OUT3 y positivos al OUT2 y OUT4).

## VII. PRUEBA DE LEVITACIÓN

Verifique que al realizar las respectivas conexiones eléctricas como se describió y alimentar el módulo L298n con un voltaje dc de 7 V, el levitador sea capaz de levitar gotas de agua. Es necesario ajustar la longitud de la cavidad hasta proporcionar la mayor presión acústica. Si mantiene una gota levitada mientras ajusta la cavidad, a mayor presión, más se deforma la gota de esferoide a elipsoide.

Siguiendo las conexiones eléctricas presentadas en la Figura 8, los transductores de ambos casquetes tienen la misma polarización y están en fase generando una onda estacionaria focalizada con un antinodo en el centro de la cavidad.<sup>21</sup> Si la polaridad de uno de los casquetes esféricos se intercambia, se produce un desfase de  $\pi$  entre las ondas emitidas por los arreglos, dando como resultado una onda estacionaria focalizada con un nodo en el centro de la cavidad. La longitud de cavidad es diferente para ambas configuraciones de fase.

## VIII. AGRADECIMIENTOS

Trabajo financiado por el Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de DGAPA-UNAM mediante el proyecto IT101023. Ruben D.M.H agradece a la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA) de la UNAM por el otorgamiento de la beca posdoctoral UNAM ICF/D/75/2022.

## REFERENCIAS

- <sup>1</sup>T. WANG, M. SAFFREN, and D. ELLEMAN, “Acoustic chamber for weightless positioning,” in *12th Aerospace Sciences Meeting*, <https://arc.aiaa.org/doi/pdf/10.2514/6.1974-155>.
- <sup>2</sup>F. J. S. Doerr, L. J. Burns, B. Lee, J. Hinds, R. L. Davis-Harrison, S. A. Frank, and A. J. Florence, “Peptide isolation via spray drying: Particle formation, process design and implementation for the production of spray dried glucagon,” *Pharmaceutical Research* **37**, 255 (2020).
- <sup>3</sup>V. Contreras, R. Valencia, J. Peralta, H. Sobral, M. Meneses-Nava, and H. Martinez, “Chemical elemental analysis of single acoustic-levitated water droplets by laser-induced breakdown spectroscopy,” *Opt. Lett.* **43**, 2260–2263 (2018).
- <sup>4</sup>R. Tuckermann, L. Puskar, M. Zavabeti, R. Sekine, and D. McNaughton, “Chemical analysis of acoustically levitated drops by raman spectroscopy,” *Analytical and Bioanalytical Chemistry* **394**, 1433–1441 (2009).
- <sup>5</sup>Y. Tian, R. G. Holt, and R. E. Apfel, “A new method for measuring liquid surface tension with acoustic levitation,” *Review of Scientific Instruments* **66**, 3349–3354 (1995), [https://pubs.aip.org/aip/rsi/article-pdf/66/5/3349/19200790/3349\\_1\\_online.pdf](https://pubs.aip.org/aip/rsi/article-pdf/66/5/3349/19200790/3349_1_online.pdf).
- <sup>6</sup>E. Trinh, P. Marston, and J. Robey, “Acoustic measurement of the surface tension of levitated drops,” *Journal of Colloid and Interface Science* **124**, 95–103 (1988).
- <sup>7</sup>R. Hirayama, D. M. Plasencia, N. Masuda, and S. Subramanian, “A volumetric display for visual, tactile and audio presentation using acoustic trapping,” *Nature* **575**, 320–323 (2019).
- <sup>8</sup>R. Kapoor, S. Ramasamy, A. Gardi, R. V. Schyndel, and R. Sabatini, “Acoustic sensors for air and surface navigation applications,” *Sensors* **18** (2018), 10.3390/s18020499.
- <sup>9</sup>Tec5, “Levitator, contactless sample positioning,” (2022), <https://tec5.com/en/products/levitator/>.

- <sup>10</sup>M. A. Andrade, N. Pérez, and J. C. Adamowski, “Review of progress in acoustic levitation,” *Brazilian Journal of Physics* **48**, 190–213 (2018).
- <sup>11</sup>R. H. Morris, E. R. Dye, P. Docker, and M. I. Newton, “Beyond the Langevin horn: Transducer arrays for the acoustic levitation of liquid drops,” *Physics of Fluids* **31**, 101301 (2019), [https://pubs.aip.org/aip/pof/article-pdf/doi/10.1063/1.5117335/15951298/101301\\_1\\_online.pdf](https://pubs.aip.org/aip/pof/article-pdf/doi/10.1063/1.5117335/15951298/101301_1_online.pdf).
- <sup>12</sup>W. Xie, C. Cao, Y. Lü, and B. Wei, “Levitation of iridium and liquid mercury by ultrasound,” *Phys. Rev. Lett.* **89**, 104304 (2002).
- <sup>13</sup>A. Marzo, S. A. Seah, B. W. Drinkwater, D. R. Sahoo, B. Long, and S. Subramanian, “Holographic acoustic elements for manipulation of levitated objects,” *Nature Communications* **6**, 8661 (2015).
- <sup>14</sup>*Airborne ultrasonic standards for hearing protection* (2008).
- <sup>15</sup>A. D. Battista, “The effect of 40 khz ultrasonic noise exposure on human hearing,” in *Proceedings of the 23rd International Congress on Acoustics : integrating 4th EAA Euroregio 2019*, 13, Vol. 9, pp. 4783–4788.
- <sup>16</sup>A. Di Battista, A. Price, R. Malkin, B. W. Drinkwater, P. Kuberka, and C. Jarrold, “The effects of high-intensity 40 khz ultrasound on cognitive function,” *Applied Acoustics* **200**, 109051 (2022).
- <sup>17</sup>A. Marzo, A. Barnes, and B. W. Drinkwater, “TinyLev: A multi-emitter single-axis acoustic levitator,” *Rev. Sci. Instrum.* **88**, 085105 (2017).
- <sup>18</sup>V. Contreras and A. Marzo, “Adjusting single-axis acoustic levitators in real time using rainbow schlieren deflectometry,” *Review of Scientific Instruments* **92**, 015107 (2021), [https://pubs.aip.org/aip/rsi/article-pdf/doi/10.1063/5.0013347/14881932/015107\\_1\\_online.pdf](https://pubs.aip.org/aip/rsi/article-pdf/doi/10.1063/5.0013347/14881932/015107_1_online.pdf).
- <sup>19</sup>R. D. Muelas-Hurtado and V. Contreras, “Levitadores ultrasónicos de arreglos en fase: estudio opto-electroacústico de cavidades con geometría plana y esférica,” in *XXXVII Congreso de Instrumentación SOMI*, 1, Vol. 9, pp. 1–14.
- <sup>20</sup>H. R. D. Muelas, J. Pazos-Ospina, and J. L. Ealo, “A non-expensive massive transducer array to generate helical wavefronts in air,” *Physics Procedia* **70**, 932–935 (2015), proceedings of the 2015 ICU International Congress on Ultrasonics, Metz, France.
- <sup>21</sup>V. Contreras and K. Volke-Sepúlveda, “Enhanced standing-wave acoustic levitation using high-order transverse modes in phased array ultrasonic cavities,” *Ultrasonics* **138**, 107230 (2024).

# Cuantización: el problema de las ambigüedades

Jerónimo Cortez<sup>\*</sup>

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

## 1. El proceso de cuantizar

En términos generales, *cuantizar* es el proceso mediante el cual se especifica la versión cuántica para un sistema clásico. El proceso consiste, esencialmente, en promover las observables clásicas de interés a operadores abstractos y determinar *un* espacio de Hilbert en el cual dichos operadores sean representados como operadores auto-adjuntos. En contraste con lo que ocurre en la teoría clásica, donde los estados del sistema corresponden a puntos en el espacio fase  $\Gamma$  y las observables son funciones  $f : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$  suaves, en la teoría cuántica los estados son elementos de un espacio de Hilbert de dimensión infinita  $\mathcal{H}$  y las observables  $\hat{f}$  son operadores auto-adjuntos en dicho espacio. Para sistemas clásicos lineales, no necesariamente con un número finito de grados de libertad (lo que incluye por tanto sistemas de campo), el programa de cuantización en espacio de Hilbert consiste, de manera precisa, en lo siguiente [1]:

### 1. Elección de observables:

Del conjunto de todas las observables clásicas  $O$ , seleccionar un subconjunto de observables “privilegiadas”  $O_0$ , al cual se le denominará *conjunto de observables básicas (elementales o fundamentales)*.

### 2. Álgebra de observables:

A partir de  $O_0$ , construir un álgebra  $\mathcal{A}$  con las siguientes propiedades: (a) Asociado a cada observable básica  $f \in O_0$ , debe haber un representante (y sólo uno)  $\hat{f}$  en  $\mathcal{A}$ , al cual se le llamará *operador básico abstracto u observable cuántica abstracta*. (b) Los operadores básicos deben satisfacer la condición de cuantización de Dirac<sup>1</sup>,  $[\hat{f}, \hat{g}] = i\widehat{\{f, g\}}$ . El álgebra  $\mathcal{A}$  es llamada *álgebra de observables cuánticas abstractas*.

---

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

<sup>1</sup>Usualmente la condición de Dirac se encuentra en los libros de texto como  $[\hat{f}, \hat{g}] = i\hbar\widehat{\{f, g\}}$ ; sin embargo, aquí estamos considerando unidades de Planck, en las que  $\hbar = 1$ , y por lo tanto no aparece el factor de  $\hbar$  en los comutadores.

### 3. Representación:

Especificar un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  y una representación de las observables básicas abstractas como operadores auto-adjuntos en  $\mathcal{H}$ .

Los anteriores requerimientos, que conforman el programa de cuantización para sistemas lineales clásicos, no están desafortunadamente exentos de ambigüedades. Esto es, para llevarlos a cabo es necesario hacer elecciones. Esta libertad implica que el programa puede cumplirse haciendo en las distintas etapas, diferentes elecciones, y por consiguiente obtenerse versiones cuánticas para el sistema que son disímiles. El programa de cuantización es inherentemente ambiguo y no hay en él criterio general alguno que permita efectuar la cuantización de manera *única*. Esto supone un problema grave, pues para *un* sistema clásico se tendrán, en general, *diferentes* descripciones cuánticas y por lo tanto distintas predicciones. Es entonces ineludible tener que formular e imponer criterios con contenido físico que permitan eliminar las ambigüedades y, con ello, lograr seleccionar *una* cuantización predilecta (módulo equivalencia unitaria).

Las ambigüedades están presentes en el programa desde un inicio; en efecto, la elección de las observables fundamentales es, de hecho, una ambigüedad. Típicamente se requiere que  $\mathcal{O}_0$ , el conjunto de observables básicas, sea un subespacio vectorial de  $\mathcal{O}$ , el espacio vectorial de todas las observables, que sea (i) cerrado bajo el paréntesis de Poisson y (ii) tal que cualquier función regular sobre el espacio fase pueda obtenerse como (posiblemente el límite de) la suma de productos de elementos en  $\mathcal{O}_0$ . Estos requerimientos, que tienen por objeto que las observables en  $\mathcal{O}_0$  sean adecuadamente (e.g. sin el problema de ordenamiento) promovidas a operadores que satisfagan las relaciones de commutación canónicas, no determinan sin embargo de manera única al conjunto de observables básicas. En general pueden estipularse distintos conjuntos de observables que cumplan los requerimientos (i)-(ii) y por lo tanto darse el caso de que elecciones distintas,  $\mathcal{O}_0$  y  $\mathcal{O}'_0$ , den lugar a descripciones cuánticas no equivalentes. Usualmente esta ambigüedad busca superarse argumentando a favor de una representación particular para el sistema clásico “por su naturalidad y simplicidad”. El segundo paso en el programa de cuantización, la construcción del álgebra  $\mathcal{A}$ , no tiene en realidad ambigüedad alguna. El álgebra  $\mathcal{A}$  se construye considerando el álgebra  $\mathcal{A}_0$  asociativa y libre sobre los números complejos generada por  $\mathcal{O}_0$ , se equipa con una operación de involución  $*$  que reproduce en el álgebra resultante,  $\mathcal{A}_0^*$ , la conjugación compleja y ante la cual las observables básicas abstractas son invariantes. La estructura algebraica que el paréntesis de Poisson proporciona en  $\mathcal{O}_0$  es llevada a una estructura algebraica en el espacio de observables cuánticas a través de considerar un ideal-\* de  $\mathcal{A}_0^*$ ,  $\mathcal{I}_D$ , con el que se impone la condición de cuantización de Dirac. El álgebra  $\mathcal{A}$  corresponde al álgebra cociente  $\mathcal{A}_0^*/\mathcal{I}_D$ . Más allá de los pormenores matemáticos que esta construcción supone<sup>2</sup> (y que usualmente se resume con la frase “la promoción de las observables clásicas a operadores”), lo importante a destacar es que no hay ambigüedad en la construcción del álgebra, producto de la cuál se define un mapeo de correspondencia  $\wedge : \mathcal{O}_0 \rightarrow \mathcal{A}$  que a cada  $f \in \mathcal{O}_0$  le asigna uno y sólo un operador abstracto  $\hat{f} \in \mathcal{A}$ , y que para cualesquiera  $f, g$  y  $\{f, g\}$  en  $\mathcal{O}_0$ , sus contrapartes en

---

<sup>2</sup>Para una revisión sobre álgebras libres y asociativas, ideales y álgebras cociente, ver por ejemplo [2]. En [3] puede consultarse la construcción de  $\mathcal{A}$ .

$\mathcal{A}$ ,  $\hat{f}$ ,  $\hat{g}$  y  $\widehat{\{f, g\}}$ , satisfacen las relaciones de commutación canónicas (RCC)  $[\hat{f}, \hat{g}] = i\widehat{\{f, g\}}$ . La relación  $f = \bar{f}$  ( $f$  es una observable clásica real, de modo que es igual a su compleja conjugada  $\bar{f}$ ) se traduce en el álgebra como  $\hat{f} = \hat{f}^*$ . Por construcción, cualquier elemento de  $\mathcal{A}$  puede expresarse como la suma de productos de los operadores básicos. El tercer y último paso en el programa, que consiste en especificar un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  en el que las observables cuánticas (abstractas) fundamentales sean representadas como operadores auto-adjuntos<sup>3</sup> ( $\hat{f} = \hat{f}^\dagger$ ), no está libre de ambigüedades: en general existen diferentes (i.e., no unitariamente equivalentes) representaciones en espacio de Hilbert para las RCC y, por consiguiente, es necesario tener que enfrentar el problema de unicidad para determinar *una* representación predilecta.

Una vez estipulado  $O_0$ , “por naturalidad y simplicidad”, queda como hemos visto la ambigüedad en la representación. Esta es la ambigüedad que nos interesa y que discutiremos en estas notas. Para el caso de un sistema lineal cualquiera, pero de dimensión finita (es decir, con un número finito de grados de libertad) sabemos que su contraparte cuántica es tratada como única y que es descrita en el marco de la teoría de mecánica cuántica, en donde la representación que se emplea es la de Schrödinger (o alguna unitariamente equivalente a ésta). Cabe preguntarnos, sin embargo, si existen o no representaciones para el sistema que, si bien cumplen con los mismos requerimientos que la representación de Schrödinger, den como resultado versiones cuánticas no equivalentes al de mecánica cuántica estándar. La respuesta es, afortunadamente, que no. La unicidad en la representación para sistemas lineales de dimensión finita es garantizada por el célebre teorema de Stone-von Neumann. En la siguiente sección se discutirá con cierto detenimiento el caso de sistemas mecánicos lineales y finitos, y se presentará el Teorema de Stone-von Neumann. Ahora bien, cuando el sistema lineal es una teoría de campo (i.e., cuando se tiene un número infinito de grados de libertad) la situación es muy distinta, pues es un hecho que para tales sistemas existe una infinidad de representaciones, *no equivalentes*, para las observables cuánticas como operadores auto-adjuntos, no obstante que las representaciones cumplen los requerimientos análogos a los que la representación de Schrödinger satisface en el caso finito. En teoría de campos no aplica el teorema de Stone-von Neumann, y no existe un análogo a éste que pueda fungir como guía para eliminar la ambigüedad en la representación en espacio de Hilbert. Para lidiar con la ambigüedad en este tipo de sistemas, es necesario elaborar criterios físicos extra que al imponerse seleccionen *una* representación predilecta. La estrategia más socorrida es requerir que las representaciones físicamente viables, sean aquellas invariantes ante las simetrías espacio-temporales del sistema de campo en cuestión. Esta estrategia permite, por ejemplo, seleccionar *una* representación predilecta en el caso de teorías de campo en espacio de Minkowski; en efecto, imponer invariancia ante el grupo de Poincaré selecciona *una* cuantización predilecta en teoría de campos en fondos planos. Incluso para el caso de teorías de campo en un fondo estacionario, donde la simetría es menor, todavía es posible seleccionar *una* representación predilecta explotando la simetría de traslación temporal [4, 5]. Sin embargo, en casos más generales, las simetrías pueden simplemente no ser suficientes

---

<sup>3</sup>El operador abstracto  $\hat{f}^*$ , producto de la operación de involución  $*$  sobre  $\hat{f}$  abstracto, es en la representación en espacio de Hilbert el operador adjunto  $\hat{f}^\dagger$  de  $\hat{f}$ .

para seleccionar una cuantización y deben entonces concebirse nuevos criterios físicos que, aunados al de simetría, permitan eliminar la ambigüedad en la representación de las RCC. Para ilustrar el problema de ambigüedad en teorías de campo en fondos curvos, consideraremos en la tercer sección de estas notas el caso de un campo escalar real propagándose en un espacio-tiempo curvo. Se exhibirá, en particular, la estructura matemática que codifica la ambigüedad en la representación de las RCC y se expondrá qué clase de criterio, además del de imponer las simetrías, ha permitido seleccionar *una* cuantización en situaciones en las que el campo se propaga en fondos no estacionarios (e.g. espacio-tiempos cosmológicos).

## 2. Sistemas finitos: Teorema de Stone-von Neumann

En esta sección consideraremos un sistema de mecánica clásica con  $n$  grados de libertad y lineal. Primero revisaremos la teoría clásica, para posteriormente discutir su cuantización.

Como es bien sabido (véase por ejemplo [6]), un estado del sistema está completamente caracterizado por los valores que tomen las variables de configuración  $q^i$  y sus respectivos momentos canónicamente conjugados  $p_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Puesto que bajo transformaciones canónicas la física del sistema no cambia, podrían considerarse para describir el sistema otras coordenadas y momentos generalizados,  $(Q^i, P_i)$ , relacionados con  $(q^i, p_i)$  vía una transformación canónica. Sin embargo, de todas las posibles elecciones de configuración y momento que pueden hacerse, supondremos que  $(q^i, p_i)$  es “la más natural y simple” para el sistema<sup>4</sup> [Por ejemplo, piénsese en el oscilador armónico simple, donde “lo más natural y simple” es considerar la posición fuera del equilibrio,  $q$ , como la configuración.] El espacio fase  $\Gamma$ , que es el espacio de todos los posibles estados que el sistema pueda tomar, es en este caso isomórfico a  $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$  y está coordinado globalmente por  $(q^1, \dots, q^n; p_1, \dots, p_n)$ . Para ser más precisos, el espacio fase es el haz cotangente del espacio de configuración  $C$  (i.e.,  $\Gamma = T^*C \approx \mathbb{R}^{2n}$ ), es un espacio vectorial debido a la linealidad del sistema y está equipado con la 2-forma simpléctica<sup>5</sup>

$$\Omega_{ab} = (dp_i)_a (dq^i)_b - (dq^i)_a (dp_i)_b. \quad (2.1)$$

El conjunto de observables del sistema,  $O = \{f : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}; f \text{ suave}\}$ , es un espacio vectorial de dimensión infinita y cuenta con una estructura algebraica, conocida como paréntesis de Poisson (PP), definida por (el inverso de) la 2-forma simpléctica,

$$\{f, g\} = \Omega^{ab} (df)_a (dg)_b. \quad (2.2)$$

Puesto que las variables canónicas  $q^i$  y  $p_i$  son funciones suaves sobre  $\Gamma$  (son las funciones coordenadas) éstas son observables. El álgebra básica de Poisson, que se obtiene al aplicar (2.2) a las observables de configuración y momento, es

$$\{q^i, p_j\} = \delta_j^i, \quad \{q^i, q^j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0. \quad (2.3)$$

---

<sup>4</sup>En el caso de sistemas finitos no es crítica la elección, pues genéricamente para estos sistemas las transformaciones canónicas tienen una contraparte unitaria en la teoría cuántica.

<sup>5</sup>Aquí usamos la convención de suma sobre índices repetidos; es decir, por  $A_i B^i$  debe entenderse la suma  $\sum_i A_i B^i$ .

La dinámica está regida por el Hamiltoniano  $H$  del sistema, y las posibles trayectorias dinámicas corresponden a las curvas integrales del campo  $X_H^a = \Omega^{ab}(dH)_b$  asociado a  $H$ . Puesto que el sistema es lineal, las curvas integrales del campo Hamiltoniano (que cubren todo  $\Gamma$ ) no se intersectan. Nótese que  $\Gamma$  está en relación uno a uno con  $S$ , el espacio de soluciones a las ecuaciones de movimiento, y que también es un espacio vectorial. En efecto, cada estado  $\gamma \in \Gamma$  es condición inicial de una (y sólo una) solución  $s \in S$ . Si  $t_0$  denota un tiempo inicial, la relación entre soluciones y datos iniciales está dada por un isomorfismo  $I_{t_0} : S \rightarrow \Gamma$  que asigna a la solución  $\tilde{s}(t)$  su dato inicial a  $t = t_0$ ,  $I_{t_0}(\tilde{s}) = (\tilde{q}^i, \tilde{p}_i)_{t_0} = \tilde{\gamma}_{t_0}$ . Si se considera como inicial otro tiempo, digamos un  $t_1 > t_0$ , la identificación entre  $S$  y  $\Gamma$  estará dada por un isomorfismo  $I_{t_1}$  que ahora asigna a la solución  $\tilde{s}(t)$  su dato inicial a  $t = t_1$ ,  $I_{t_1}(\tilde{s}) = (\tilde{q}^i, \tilde{p}_i)_{t_1} = \tilde{\gamma}_{t_1}$ . Obsérvese que  $\tilde{\gamma}_{t_0}$  y  $\tilde{\gamma}_{t_1}$  están relacionados por  $\tilde{\gamma}_{t_1} = \tau_{(t_1, t_0)}\tilde{\gamma}_{t_0}$ , donde  $\tau_{(t_1, t_0)} = I_{t_1} \circ I_{t_0}^{-1}$ . El mapeo  $\tau_{(t_1, t_0)}$  corresponde entonces a la evolución temporal de los estados en  $\Gamma$  entre  $t_0$  y  $t_1$ ; esto es,  $\tau_{(t_2, t_1)}$  es la transformación canónica de evolución de los estados en  $\Gamma$  entre cualesquiera  $t_1$  y  $t_2$ .

Gracias a la estructura vectorial de  $\Gamma$ , puede identificarse el espacio tangente en cualquier punto  $\gamma \in \Gamma$  con  $\Gamma$  mismo, lo que permite definir entonces el mapeo bilineal antisimétrico

$$\Omega : \Gamma \times \Gamma \rightarrow \mathbb{R}, \quad (\gamma_1, \gamma_2) \mapsto \Omega(\gamma_1, \gamma_2) := \Omega_{ab}\gamma_1^a\gamma_2^b = (p_1)_i(q_2)^i - (p_2)_i(q_1)^i, \quad (2.4)$$

conocido como estructura simpléctica. Claramente  $\Omega(\lambda, \cdot)$ , con  $\lambda$  un estado fijo, es una función lineal sobre el espacio fase  $\Gamma$ . Para  $\lambda = (0, \dots, q^m = 1, 0, \dots, 0)$ , la función  $\Omega(\lambda, \cdot)$  asigna al estado  $\gamma = (q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n) \in \Gamma$  el valor  $-p_m$ , de acuerdo a la ec. (2.4). Análogamente, si la etiqueta (i.e., estado fijo) es  $\lambda = (0, \dots, p_m = 1, 0, \dots, 0)$ , entonces la función  $\Omega(\lambda, \cdot)$  coincide con la función coordenada  $q^m$ . Así, tenemos que para una etiqueta cualquiera, digamos  $\lambda = (\alpha^1, \dots, \alpha^n, \beta_1, \dots, \beta_n)$ , la función  $\Omega(\lambda, \cdot)$  es una combinación lineal de las funciones coordenadas  $q^i$  y  $p_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ). No es difícil ver entonces que

$$\{\Omega(\mu, \cdot), \Omega(\nu, \cdot)\} = -\Omega(\mu, \nu). \quad (2.5)$$

Hemos mencionado antes que la relación entre  $S$  y  $\Gamma$  es uno a uno. Ello implica, en particular, que la estructura simpléctica en  $\Gamma$  define de manera natural una estructura simpléctica  $\Omega'$  en  $S$ , según  $\Omega'(s_1, s_2) = \Omega(I_{t_0}s_1, I_{t_0}s_2)$ ; i.e.,  $\Omega' = I_{t_0}^*\Omega$ . Podríamos preguntarnos si  $\Omega'$  depende del tiempo inicial que se elige para la identificación entre  $S$  y  $\Gamma$ , la respuesta es que no, que  $\Omega'$  es independiente de ello. En efecto, como  $\tau_{(t, t_0)}$  es un simplectomorfismo, entonces  $\Omega(I_{t_0}s_1, I_{t_0}s_2) = \Omega(\tau_{(t, t_0)}I_{t_0}s_1, \tau_{(t, t_0)}I_{t_0}s_2) = \Omega(I_t s_1, I_t s_2)$ , donde en la última igualdad se usó el hecho de que  $\tau_{(t, t_0)} = I_t \circ I_{t_0}^{-1}$ . Por lo tanto,  $\Omega' = I_{t_0}^*\Omega = I_t^*\Omega$  (i.e.,  $\Omega'$  es independiente del tiempo que se empleó para la identificación). En lo que sigue, y mientras no se preste a confusión, se denominará a la estructura simpléctica en  $S$  también por  $\Omega$ . Al igual que el espacio fase, el espacio  $(S, \Omega)$  es un espacio vectorial simpléctico.

El primer paso en la cuantización del sistema, como se mencionó en la sección inicial, es elegir un conjunto de observables básicas. En este caso el conjunto natural es el generado por las observables lineales  $\Omega(\lambda, \cdot)$  y la función constante  $1(\gamma) = 1$ ; i.e.,  $\mathcal{O}_0$  es el espacio vectorial generado por  $\{1, \Omega(\lambda, \cdot)\}$ . Este espacio vectorial es, efectivamente, (i) cerrado bajo el PP [cf. ec. (2.5)] y tal que (ii) las funciones regulares sobre  $\Gamma$  pueden obtenerse como (posiblemente el límite de) la suma de productos de elementos en  $\mathcal{O}_0$ . Es a partir de este espacio de

observables clásicas fundamentales que se construye el álgebra  $\mathcal{A}$  de observables cuánticas abstractas. Dada  $\Omega(\lambda, \cdot) \in \mathcal{O}_0$ , con  $\lambda = (a^i, b_i)$ , se tiene el mapeo de correspondencia

$$\Omega(\lambda, \cdot) \xrightarrow{\wedge} \hat{\Omega}(\lambda, \cdot) = b_i \hat{q}^i - a^i \hat{p}_i. \quad (2.6)$$

Los operadores fundamentales, que no son otra cosa más que combinaciones lineales de los operadores de configuración y momento abstractos, satisfacen las RCC

$$[\hat{\Omega}(\lambda, \cdot), \hat{\Omega}(\nu, \cdot)] = -i \hat{I} \Omega(\lambda, \nu). \quad (2.7)$$

Puesto que en general no existen representaciones de las RCC por operadores acotados [7, 8], debe lidiarse en las representaciones con el dominio de definición de  $\hat{\Omega}$ . Peor aún, debe lidiarse con el dominio de definición para elementos polinomiales en  $\mathcal{A}$  de operadores fundamentales. Para evitar esta complicación técnica se consideran entonces los operadores  $W(\lambda) = \exp[i \hat{\Omega}(\lambda, \cdot)]$ , que son operadores acotados (continuos respecto a  $\lambda$  en la topología fuerte de operadores). Las RCC, así como la invariancia de los operadores básicos  $\hat{\Omega}(\lambda, \cdot)$  ante  $*$ , son capturadas en las llamadas relaciones de Weyl,

$$W(\lambda)W(\nu) = e^{\frac{i}{2}\Omega(\lambda, \nu)} W(\lambda + \nu), \quad (2.8)$$

$$W^*(\lambda) = W(-\lambda). \quad (2.9)$$

De estas relaciones, y usando que  $\hat{\Omega}(\lambda, \cdot)$  es el generador de  $W(\lambda)$ , se sigue que  $W(\lambda)W^*(\lambda) = W^*(\lambda)W(\lambda) = \hat{I}$  [i.e.,  $W^*(\lambda)$  es el inverso de  $W(\lambda)$ ]. Esto significa que una representación de las RCC por operadores auto-adjuntos  $\hat{\Omega}(\lambda, \cdot)$ , equivale a una representación de las relaciones de Weyl por operadores fuertemente continuos y unitarios  $W(\lambda)$ .

Usando (2.6) y la versión exponencial de  $\hat{\Omega}(\lambda, \cdot)$  se tiene que, para las etiquetas de la forma  $\lambda = (0, \dots, 0; 0, \dots, 0, b_{j_0}, 0, \dots, 0)$ ,  $W(\lambda) = \exp[ib_{j_0}\hat{q}^{j_0}] =: \mathcal{U}(b_{j_0})$ . Este operador se puede escribir de manera más sencilla como  $\mathcal{U}_j(b) = \exp[ib\hat{q}^j]$ , con  $b \in \mathbb{R}$ . Análogamente, para  $\lambda = (0, \dots, 0, -a^{j_0}, 0, \dots, 0; 0, \dots, 0)$  tendremos  $\mathcal{V}_j(a) = \exp[ia\hat{p}^j]$ , con  $a \in \mathbb{R}$ . La relación (2.8) en términos de los operadores  $\mathcal{U}_j(b)$  y  $\mathcal{V}_j(a)$  (donde  $j = 1, \dots, n$ ) se traduce en las siguientes relaciones

$$\mathcal{V}_i(a)\mathcal{U}_j(b) = e^{iab\delta_{ij}} \mathcal{U}_j(b)\mathcal{V}_i(a), \quad (2.10a)$$

$$[\mathcal{X}_i(s), \mathcal{X}_j(s')] = 0, \quad \mathcal{X}_i(s + s') = \mathcal{X}_i(s)\mathcal{X}_i(s'); \quad \mathcal{X}_i = \mathcal{U}_i, \mathcal{V}_i, \quad (2.10b)$$

en tanto que (2.9) es simplemente

$$\mathcal{X}_i^*(s) = \mathcal{X}_i(-s). \quad (2.11)$$

El tercer y último paso en programa de cuantización consiste en especificar una representación en espacio de Hilbert en la que los operadores  $\mathcal{U}_j(s)$  y  $\mathcal{V}_j(s)$  [equivalentemente, los operadores  $W(\lambda)$ ] sean operadores unitarios, fuertemente continuos en  $s$  [fuertemente continuos en  $\lambda$ ] y que satisfagan las relaciones de Weyl (2.10a, 2.10b)-(2.11) [que satisfagan las relaciones (2.8)-(2.9)]. La condición de unitariedad y continuidad fuerte, junto con

la segunda relación en (2.10b), garantizan la existencia de generadores auto-adjuntos<sup>6</sup> para  $\mathcal{U}_j(s)$  y  $\mathcal{V}_j(s)$ ; esto es,  $\mathcal{U}_j(s) = \exp(is\hat{q}^j)$  y  $\mathcal{V}_j(s) = \exp(is\hat{p}^j)$ , con  $\hat{q}^j$  y  $\hat{p}_j$  operadores auto-adjuntos en el Hilbert  $\mathcal{H}$  de representación. Las condiciones (2.11) evidentemente se satisfacen,  $X_i^\dagger(s) = X_i(-s)$  en  $\mathcal{H}$ . El cumplimiento de las relaciones (2.10a) y las primeras relaciones en (2.10b), son la versión exponencial de las relaciones de commutación canónicas para los generadores,  $[\hat{q}^i, \hat{p}_j] = i\hat{1}\delta^i_j$ ,  $[\hat{q}^i, \hat{q}^j] = 0$  y  $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$ .

Es natural requerir que la representación de las relaciones de Weyl sea, además, irreducible. Esto es, que para cualquier  $\Psi \in \mathcal{H}$ , el espacio generado por todos los vectores de la forma<sup>7</sup>  $W(\lambda)\Psi$  ( $\lambda \in \mathbb{R}^{2n}$ ) sea un subespacio denso de  $\mathcal{H}$ . Esta condición extra es en efecto natural, pues evita que  $\mathcal{H}$  pueda descomponerse como la suma directa de representaciones irreducibles que tendrían, entonces, que ser analizadas por separado.

Ahora bien, la cuestión es saber si requerir representaciones para las relaciones de Weyl que sean unitarias, fuertemente continuas e irreducibles, elimina o no la ambigüedad (i.e., da o no representaciones unitariamente equivalentes). La respuesta, venturosamente, es que sí. Este resultado de unicidad es justamente lo que enuncia el famoso teorema de Stone-von Neumann (ver, por ejemplo, [7]):

**Teorema** (Stone-von Neumann): Sea  $(\Gamma, \Omega)$  un espacio vectorial simpléctico de dimensión finita. Sean  $(\mathcal{H}, \mathcal{U}_i(s), \mathcal{V}_i(t))$  y  $(\mathcal{H}', \mathcal{U}'_i(s), \mathcal{V}'_i(t))$  dos representaciones unitarias, fuertemente continuas e irreducibles de las relaciones de Weyl (2.10a,2.10b)-(2.11). Entonces,  $(\mathcal{H}, \mathcal{U}_i(s), \mathcal{V}_i(t))$  y  $(\mathcal{H}', \mathcal{U}'_i(s), \mathcal{V}'_i(t))$  son unitariamente equivalentes.

La representación de Schrödinger en mecánica cuántica estándar, donde el espacio de Hilbert es  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n, d^n q)$  y en la que los operadores abstractos de configuración  $\hat{q}^j$  y momento  $\hat{p}_j$  son representados multiplicativamente y por derivación,  $\hat{q}^i\Psi = q^i\Psi$  y  $\hat{p}_j\Psi = -i\partial\Psi/\partial q^j$ ,  $\Psi \in L^2(\mathbb{R}^n, d^n q)$ , es una representación unitaria, fuertemente continua e irreducible para las relaciones de Weyl, con  $\mathcal{U}_j(s) = \exp(is\hat{q}^j)$  y  $\mathcal{V}_j(s) = \exp(is\hat{p}^j)$ :

$$(\mathcal{U}_j(s)\Psi)(q^1, \dots, q^n) = e^{isq^j}\Psi(q^1, \dots, q^n), \quad (2.12a)$$

$$(\mathcal{V}_j(s)\Psi)(q^1, \dots, q^n) = \Psi(q^1, \dots, q^j + s, \dots, q^n). \quad (2.12b)$$

Así que, para sistemas lineales finitos, tenemos que la *única* representación unitaria, fuertemente continua e irreducible de las relaciones de Weyl es (módulo equivalencia unitaria) la representación de Schrödinger. La evolución clásica, dictada por el grupo de simplectomorfismos  $\tau_{(t,t_0)} : \Gamma \rightarrow \Gamma$ , tiene como contraparte en  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n, d^n q)$  un grupo de operadores unitarios  $U_{(t,t_0)} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  que rigen la dinámica cuántica.

Una hipótesis central en el teorema de Stone-von Neumann es la finitud del espacio clásico de estados,  $(\Gamma, \Omega)$ . Para sistemas con espacio fase de dimensión infinita (i.e., sistemas

---

<sup>6</sup>En efecto, como es bien sabido [9], si  $F(s)$  es un grupo uniparamétrico de operadores unitarios fuertemente continuos en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ , entonces existe un operador auto-adjunto  $A$  en  $\mathcal{H}$  tal que  $F(s) = \exp(isA)$ .

<sup>7</sup> $W(\lambda) = \exp\left(\frac{-i}{2}a^j b_j\right) \prod_{k=1}^n \mathcal{V}_k(a^k) \mathcal{U}_k(b_k)$ , para  $\lambda = (-a^1, \dots, -a^n, b_1, \dots, b_n) \in \mathbb{R}^{2n}$ .

de campo), el teorema no aplica y deben entonces buscarse e imponerse (tantos) criterios físicos (como hagan falta) para seleccionar *una* representación predilecta de las relaciones de Weyl (equivalentemente, de las RCC). Antes de discutir el problema de la cuantización en campos, cerraremos esta sección exhibiendo la representación de Fock (unitariamente equivalente a la de Schrödinger) para el sistema:

Las observables tipo aniquilación y creación que las variables de configuración y momento (o un reescalado de éstas) definen son

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(q^j + ip_j), \quad \bar{a}_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(q^j - ip_j). \quad (2.13)$$

Usando (2.3), es fácil ver que sus paréntesis de Poisson están dados por

$$\{a_i, \bar{a}_j\} = -i\delta_{ij}, \quad \{a_i, a_j\} = 0, \quad \{\bar{a}_i, \bar{a}_j\} = 0. \quad (2.14)$$

Ahora bien, como  $q^j = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_j + \bar{a}_j)$  y  $p_j = \frac{i}{\sqrt{2}}(\bar{a}_j - a_j)$ , entonces las observables abstractas fundamentales [cf. ec. (2.6)] pueden expresarse como

$$\hat{\Omega}(\lambda, \cdot) = i(\bar{\xi}^j \hat{a}_j) - i(\xi^j \hat{a}_j^*); \quad \lambda = (\alpha^j, \beta_j), \quad \xi^j = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha^j + i\beta^j). \quad (2.15)$$

Los operadores abstractos  $\hat{a}_j$  y  $\hat{a}_j^*$  satisfacen las relaciones de conmutación

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = \hat{I}\delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0, \quad [a_i^*, \hat{a}_j^*] = 0. \quad (2.16)$$

Sea  $\mathcal{F}_m$  el espacio de Hilbert en que  $\hat{a}_m$  y  $\hat{a}_m^*$  son representados como operadores de aniquilación y creación,  $\hat{a}_m$  y  $\hat{a}_m^\dagger$ , respectivamente: El estado- $m$  de “vacío”,  $\psi_0^{(m)}$  es el estado aniquilado por  $\hat{a}_m$  (i.e.,  $\hat{a}_m \psi_0^{(m)} = 0$ ), en tanto que los estados- $m$  excitados corresponden a los estados que se obtienen de la aplicación sucesiva del operador de creación  $\hat{a}_m^\dagger$  sobre  $\psi_0^{(m)}$  (i.e., el  $k$ -ésimo estado- $m$  excitado está dado por  $\psi_k^{(m)} = N_k (\hat{a}_m^\dagger)^k \psi_0^{(m)}$ , donde  $N_k$  es una constante de normalización). El espacio de Hilbert de la teoría cuántica es el espacio de Fock

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{F}_n \cong L^2(\mathbb{R}^n, d^n q). \quad (2.17)$$

Los operadores  $\hat{a}_j$  y  $\hat{a}_j^\dagger$  satisfacen las relaciones de conmutación (2.16). Las observables abstractas  $\hat{\Omega}(\lambda, \cdot)$  son representadas entonces en  $\mathcal{F}$  como operadores auto-adjuntos definidos por (2.15) y obedecen las RCC (2.7).

Las representaciones de Schrödinger y de Fock,  $(L^2(\mathbb{R}^n, d^n q), \hat{\Omega}(\lambda, \cdot))$  y  $(\mathcal{F}, \hat{\Omega}(\lambda, \cdot))$ , son simplemente dos realizaciones de la misma teoría cuántica.

### 3. Sistemas de campo

Para ilustrar el problema de la ambigüedad en la representación en teoría de campos en fondos curvos, consideraremos el sistema de un campo escalar real y masivo, propagándose

en un espacio-tiempo  $4 - D$ ,  $(M, g_{ab})$ , globalmente hiperbólico<sup>8</sup> con topología  $M \approx \mathbb{R} \times \Sigma$  y  $\Sigma$  compacta.

### 3.1. Teoría clásica

Denotemos por  $C^\infty(\Sigma)$  al conjunto de todas las funciones reales y suaves sobre  $\Sigma$ . El espacio fase del sistema es el espacio lineal simpléctico  $(\Gamma, \Omega)$ , donde  $\Gamma$  es el espacio vectorial real  $\Gamma = \{(\varphi, \pi); \varphi, \pi \in C^\infty(\Sigma)\}$  y  $\Omega : \Gamma \times \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$  es la estructura simpléctica

$$\Omega((\varphi, \pi)_1, (\varphi, \pi)_2) = \int_{\Sigma} d^3y (\pi_1 \varphi_2 - \pi_2 \varphi_1). \quad (3.1)$$

El conjunto  $\mathcal{O}_0$ , como en el caso finito, corresponde al espacio vectorial generado por las funciones lineales  $\Omega(\lambda, \cdot)$  y la función constante  $1(\lambda) = 1$ , pero ahora con  $\lambda = (g, f)$  y  $f, g \in C^\infty(\Sigma)$  –de manera que  $\Omega(\lambda, \cdot)$  y  $1$  son en realidad funcionales–. Las observables de configuración y momento son las asociadas a las etiquetas  $\lambda = (0, f)$  y  $\lambda = (-g, 0)$ ,

$$\varphi[f] = \Omega((0, f), \cdot), \quad \pi[g] = \Omega((-g, 0), \cdot). \quad (3.2)$$

El PP definido por la forma simpléctica (3.1) tiene exactamente la misma forma que (2.5), de manera que, en particular, el PP entre las observables de configuración y momento está dada por

$$\{\varphi[f], \pi[g]\} = \Omega((0, f), (g, 0)). \quad (3.3)$$

Una foliación del espacio-tiempo  $(M, g_{ab})$  por hipersuperficies de Cauchy  $\Sigma_t$ , parametrizadas por una función de tiempo global  $t : M \rightarrow \mathbb{R}$ , define una familia uniparamétrica de encajes de  $\Sigma$  como superficies de Cauchy en  $M$ ;  $\Sigma \mapsto E_t(\Sigma) = \Sigma_t \subset M$ . Sea  $t = t_0$  el tiempo de referencia inicial ( $t_0$  es cualquier valor fijo que elijamos en  $\mathbb{R}$ ) y sea  $S$  el espacio de soluciones suaves a la ecuación del campo escalar de Klein-Gordon,  $(g^{ab}\nabla_a\nabla_b - m^2)\phi = 0$ . El espacio de soluciones  $S$  es un espacio vectorial, y sus elementos tienen como datos iniciales a  $(\varphi, \pi) \in \Gamma$  al tiempo de referencia inicial  $t_0$ ;  $S$  y  $\Gamma$  están relacionados por la biyección  $I_{t_0} : S \rightarrow \Gamma$ ,

$$S \ni \phi \mapsto I_{t_0}\phi = (\varphi, \pi) \in \Gamma, \quad \varphi = E_{t_0}^*\phi, \quad \pi = E_{t_0}^*(\sqrt{h}L_n\phi). \quad (3.4)$$

Aquí,  $h$  denota el determinante de la 3-métrica  $h_{ab}$  inducida en  $\Sigma_{t_0}$ , mientras que  $L_n$  es la derivada de Lie a lo largo de la normal unitaria a la hipersuperficie inicial  $\Sigma_{t_0}$ . Asociado con cualquier otro encaje  $E_t$  se tendrá también una biyección  $I_t : S \rightarrow \Gamma$  como en (3.4) pero a tiempo  $t$ . Así, tenemos que para una solución cualquiera,  $\phi = I_t^{-1}(\varphi, \pi)_t = I_{t_0}^{-1}(\varphi, \pi)_{t_0}$  y por tanto el estado a tiempo  $t$ ,  $(\varphi, \pi)_t \in \Gamma$ , se relaciona con el estado inicial  $(\varphi, \pi)_{t_0} \in \Gamma$  por  $(\varphi, \pi)_t = \tau_{(t, t_0)}(\varphi, \pi)_{t_0}$ , donde  $\tau_{(t, t_0)} = I_t \circ I_{t_0}^{-1}$  no es más que el mapeo (transformación canónica) de evolución de los estados entre  $t_0$  y  $t$ , en completa analogía con el caso finito expuesto

---

<sup>8</sup>La hiperbolicidad global significa, esencialmente, que el espacio-tiempo puede ser foliado por hipersuperficies tridimensionales  $\Sigma_t$  tipo-espacio que siguen el flujo dado por un campo vectorial  $t^a$  tipo-tiempo y suave, definido en toda la variedad pseudo-Riemanniana  $(M, g_{ab})$ . Esto, en términos formales, significa que  $M$  admite una hipersuperficie de Cauchy [7].

en la sección anterior. Para  $t_0$  fija,  $\{\tau_{(t,t_0)}\}$  es un grupo uniparamétrico de transformaciones simplécticas. Al igual que en el caso finito,  $\Omega$  define una estructura simpléctica en  $S$  (a la cual también denotaremos por  $\Omega$ ) que es independiente de la biyección  $I_t$  que se considere en su definición. Explícitamente, la estructura simpléctica en  $S$  está dada por

$$\Omega(\phi_1, \phi_2) = \int_{\Sigma_{t_0}} d^3x \sqrt{h} (\phi_2 L_n \phi_1 - \phi_1 L_n \phi_2). \quad (3.5)$$

La independencia de  $\Omega$  en  $I_t$  garantiza que la integración en (3.5) es independiente de la hipersuperficie de Cauchy que se elija para realizarla.

Alternativamente a  $(\Gamma, \Omega)$ , *espacio fase canónico*, puede considerarse al *espacio fase covariante*  $(S, \Omega)$  como el espacio fase de la teoría. La evolución temporal en  $S$  está dada por el grupo uniparamétrico de simplectomorfismo  $T_{(t,t_0)} = I_{t_0}^{-1} \circ \tau_{(t,t_0)} \circ I_{t_0} = I_{t_0}^{-1} \circ I_t$ . El conjunto  $O_0$  en la descripción de espacio fase covariante corresponde al espacio vectorial generado por  $\{1, \Omega(\phi, \cdot)\}$ . El PP definido por  $\Omega$  en  $S$  tiene, también, la misma forma que en el espacio fase canónico  $\Gamma$  [análogo al caso finito, cf. ec. (2.5)]; es decir,  $\{\Omega(\phi, \cdot), \Omega(\tilde{\phi}, \cdot)\} = -\Omega(\phi, \tilde{\phi})$ .

En resumen, para la teoría del campo de Klein-Gordon real  $\phi$ , puede adoptarse la descripción canónica, espacio fase  $(\Gamma, \Omega)$  constituido por las configuraciones y momentos del campo  $(\varphi, \pi)$ , o equivalentemente la descripción covariante, espacio fase  $(S, \Omega)$  constituido por soluciones suaves  $\phi$  a la ecuación de Klein-Gordon con datos de Cauchy  $(\varphi, \pi) \in \Gamma$ . El espacio fase puede denotarse genéricamente por  $(V, \Omega)$ , donde la formulación en el espacio fase canónico corresponderá a  $V = \Gamma$  y  $\Omega$  dada por (3.1), mientras que la formulación en el espacio fase covariante corresponderá a  $V = S$  y  $\Omega$  dada por (3.5). El conjunto de observables fundamentales  $O_0$  es el espacio vectorial generado por las funcionales lineales  $\Omega(v, \cdot) : V \rightarrow \mathbb{R}$  y  $1(v) = 1, \forall v \in V$ .

### 3.2. Estructura compleja

El espacio vectorial  $V$  puede equiparse con una estructura compleja. Es decir, con un isomorfismo lineal  $J : V \rightarrow V$  tal que  $J^2 = -I$ , donde  $I$  es el mapeo identidad en  $V$ . Como veremos más adelante, este elemento matemático es crucial pues permite definir un producto interno en el espacio fase y constituye el ingrediente fundamental en la construcción sistemática del espacio de Hilbert de la teoría cuántica. Nótese que existe una infinidad de mapeos en  $V$  con las propiedades de estructura compleja; es decir, se puede especificar una infinidad de estructuras complejas en  $V$ . Dada una estructura compleja  $J$  en  $V$ , ésta define los espacios vectoriales complejos

$$V_J^\pm := \{v^\pm ; v^\pm = \frac{1}{2}(v \mp iJv), v \in V\}. \quad (3.6)$$

Es fácil verificar que el espacio vectorial complejo  $V_J^+ \oplus V_J^-$ , coincide con el espacio que se obtiene por complexificación de  $V$ ,  $V_{\mathbb{C}} = V \oplus iV$ . Así pues, la estructura compleja  $J$  separa a  $V_{\mathbb{C}}$  como  $V_{\mathbb{C}} = V_J^+ \oplus V_J^-$ . Nótese que asociada a la estructura compleja  $J$  se tiene la descomposición  $v = v^+ + v^-$  de  $v \in V$ , con  $v^\pm \in V_J^\pm$ . Si se considera una estructura compleja diferente, digamos  $J'$ , se tendrá una separación distinta para  $V_{\mathbb{C}}$ ,  $V_{\mathbb{C}} = V_{J'}^+ \oplus V_{J'}^-$ , y una descomposición diferente de  $v$ ,  $v = v'^+ + v'^-$ . La acción de  $J$  puede extenderse de  $V$  a  $V_{\mathbb{C}}$

utilizando linealidad compleja, y es sencillo ver entonces que  $V^\pm$  son espacios propios de  $J$  con valores propios  $\pm i$ ,

$$Jv^+ = iv^+, \quad Jv^- = -iv^-. \quad (3.7)$$

Los vectores propios de dos estructuras complejas diferentes,  $J$  y  $J'$ , están relacionados por  $v'^\pm = v^\pm \pm \frac{i}{2}(J - J')v$ .

Del conjunto de todas las estructuras complejas que sobre  $V$  pueden darse, hay un subconjunto (en general también infinito) de estructuras complejas compatibles con la estructura simpléctica. Una estructura compleja  $J$  se dice que es compatible con  $\Omega$  si es un mapeo simpléctico [i.e.,  $\Omega(Jv_1, Jv_2) = \Omega(v_1, v_2)$ ,  $\forall v_1, v_2 \in V$ ] y  $\Omega(Jv, v) > 0$  para toda  $v \in V$  distinta de cero. Denotemos por  $\mathbb{J}(V, \Omega)$ , al conjunto de todas las estructuras complejas en  $V$  compatibles con  $\Omega$ . Sea  $J \in \mathbb{J}(V, \Omega)$ , entonces el mapeo bilineal simétrico

$$\mu_J : V \times V \rightarrow \mathbb{R}, \quad (v, w) \mapsto \mu_J(v, w) := \Omega(Jv, w), \quad (3.8)$$

define un producto interno en el espacio vectorial simpléctico  $(V, \Omega)$ . Extendiendo la acción de  $J$  y  $\Omega$  al espacio vectorial complejo  $V_{\mathbb{C}}$ , es sencillo mostrar que  $\Omega(v^+, w^+) = 0$  y  $\Omega(v^-, w^-) = 0$ , para toda  $v^\pm, w^\pm \in V_J^\pm$ . Adicionalmente, es posible verificar que

$$\langle \cdot, \cdot \rangle_J : V_J^+ \times V_J^+ \rightarrow \mathbb{C}, \quad (v^+, w^+) \mapsto \langle v^+, w^+ \rangle_J := \Omega(\overline{Jv^+}, w^+), \quad (3.9)$$

cumple con las propiedades de un producto interno hermítico en  $V_J^+$ . Sea  $\mathcal{H}_J$  el espacio de Hilbert separable<sup>9</sup> que se obtiene al completar  $V_J^+$  en la norma asociada al producto (3.9). Como veremos en el siguiente apartado,  $\mathcal{H}_J$  es el espacio a partir del cual se construye el Hilbert de la teoría cuántica (asociada a la estructura compleja  $J$ ).

### 3.3. Cuantización

El primer requerimiento en el programa de cuantización, selección de las observables fundamentales, ya lo tenemos:  $\mathcal{O}_0$  es el espacio vectorial generado por  $\{1, \Omega(v, \cdot); v \in V\}$ , donde  $v = \phi \in S$  si se considera el espacio fase covariante, o bien  $v = (\varphi, \pi) \in \Gamma$  si el espacio fase es el canónico. El segundo paso en el programa es determinar el álgebra  $\mathcal{A}$  a partir de  $\mathcal{O}_0$ . Como resultado de la construcción (ver por ejemplo [3]) se obtiene, sin ambigüedad alguna, un mapeo de correspondencia que asigna a cada observable fundamental  $\Omega(v, \cdot)$  un operador abstracto  $\hat{\wedge}[\Omega(v, \cdot)] = \hat{\Omega}(v, \cdot)$  en el álgebra. Los operadores abstractos satisfacen las RCC análogas a (2.7),

$$[\hat{\Omega}(v, \cdot), \hat{\Omega}(v', \cdot)] = -i\hat{I}\Omega(v, v'). \quad (3.10)$$

El último paso en el programa consiste en especificar un espacio de Hilbert en el cual las observables básicas abstractas,  $\hat{\Omega}(v, \cdot)$ , sean representadas como operadores auto-adjuntos que satisfagan las RCC (3.10).

A continuación veremos la cuantización del sistema en cada una de las formulaciones de espacio fase, covariante ( $V = S$ ) y canónica ( $V = \Gamma$ ).

---

<sup>9</sup>La separabilidad de  $\mathcal{H}_J$  se sigue del hecho de que  $\Sigma$  es compacta.

*Representación a la Fock.*

Consideremos el caso en que el punto de partida es la descripción covariante  $V = S$  del sistema. En este caso, como se ha mencionado ya,  $\mathcal{O}_0$  es el espacio vectorial generado por  $\{1, \Omega(\phi, \cdot) ; \phi \in S\}$ . Dada una estructura compleja  $J$  compatible con  $\Omega$ , podemos descomponer a  $\phi$  como  $\phi = \phi^+ + \phi^-$ , donde  $\phi^\pm \in S_J^\pm$  son funciones propias de  $J$  con valores propios  $\pm i$ ,  $S_J^\pm$  está dada como en (3.6), y entonces  $\Omega(\phi, \cdot) = \Omega(\bar{\phi}^+, \cdot) + \Omega(\phi^+, \cdot)$ . Esta última expresión se obtiene usando la linealidad de  $\Omega$  en la primera entrada y que  $\phi^- = \bar{\phi}^+$ . En términos de observables tipo creación y aniquilación asociadas a la estructura compleja  $J$ ,  $a_J(\phi^+) = \Omega(J\phi^+, \cdot)$  y  $a_J(\bar{\phi}^+) = \Omega(J\bar{\phi}^+, \cdot)$ , un cálculo sencillo muestra que  $\Omega(\phi, \cdot)$  está dada por

$$\Omega(\phi, \cdot) = ia_J(\bar{\phi}^+) - i\bar{a}_J(\phi^+). \quad (3.11)$$

Podemos considerar entonces al conjunto de observables fundamentales (equivalente a  $\mathcal{O}_0$ ) como el generado por  $\{1, a_J(\bar{\chi}), \bar{a}_J(\xi) ; \chi, \xi \in S_J^+\}$ . Es un ejercicio sencillo verificar que el PP entre las variables tipo aniquilación y creación está dado por

$$\{a_J(\bar{\chi}), \bar{a}_J(\xi)\} = -i\langle \chi, \xi \rangle_J, \quad (3.12)$$

con el resto de los paréntesis –i.e.,  $\{a_J(\bar{\chi}), a_J(\bar{\xi})\}$  y  $\{\bar{a}_J(\chi), \bar{a}_J(\xi)\}$ – siendo nulos.

Como resultado de la construcción del álgebra  $\mathcal{A}$ , a partir de  $\{1, a_J(\bar{\chi}), \bar{a}_J(\xi) ; \chi, \xi \in S_J^+\}$ , se obtienen los operadores abstractos  $\hat{a}_J(\bar{\chi})$  y  $\hat{a}_J^*(\xi)$  que obedecen las relaciones de commutación

$$[\hat{a}_J(\bar{\chi}), \hat{a}_J^*(\xi)] = \hat{I}\langle \chi, \xi \rangle_J, \quad [\hat{a}_J(\bar{\chi}), \hat{a}_J(\bar{\xi})] = 0, \quad [\hat{a}_J^*(\chi), \hat{a}_J^*(\xi)] = 0. \quad (3.13)$$

La contraparte cuántica de las observables (3.11) son los operadores abstractos

$$\hat{\Omega}(\phi, \cdot) = i\hat{a}_J(\bar{\phi}^+) - i\hat{a}_J^*(\phi^+), \quad (3.14)$$

que satisfacen las RCC (3.10), con  $v = \phi, v' = \phi' \in S$ . La ec. (3.14) es el análogo en la teoría del campo escalar a la ec. (2.15) para el sistema mecánico lineal y finito de la Sec. 2.

Ahora bien, para especificar una representación de las RCC en espacio de Hilbert, en que los operadores abstractos  $\hat{\Omega}(\phi, \cdot)$  sean operadores auto-adjuntos, emplearemos la estructura de espacio de Hilbert construida vía  $J \in \mathbb{J}(S, \Omega)$ , establecida justo al final del anterior apartado. Esto es, consideramos el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_J$  que se obtiene al completar  $S_J^+$  respecto a la norma definida por el producto interno hermítico  $\langle \cdot, \cdot \rangle_J = \Omega(\overline{J \cdot}, \cdot)$  [cf. ec. (3.9)]. Este espacio de Hilbert, conocido como *el espacio de Hilbert de una partícula*, es a través del cual se especifica el espacio de Hilbert de la teoría cuántica. De manera concreta, el espacio de Hilbert de la teoría cuántica es el espacio de Fock simétrico construido a partir de  $\mathcal{H}_J$ :

$$\mathcal{F}_J = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \left( \otimes_{(s)}^n \mathcal{H}_J \right). \quad (3.15)$$

Los operadores abstractos  $\hat{a}_J(\bar{\chi})$  y  $\hat{a}_J^*(\xi)$ , que como vimos están sujetos a las relaciones de commutación (3.13), son de manera natural representados en  $\mathcal{F}_J$  como operadores de aniquilación y creación,  $\hat{a}_J(\bar{\chi})$  y  $\hat{a}_J^\dagger(\xi)$ , respectivamente. Las observables fundamentales abstractas

$\hat{\Omega}(\phi, \cdot)$  son por consiguiente representadas en  $\mathcal{F}_J$  como operadores auto-adjuntos, definidos por la ec. (3.14), y obedecen las RCC (3.10). Salvo el operador  $\hat{\Omega}(0, \cdot)$ , el resto de observables  $\hat{\Omega}(\phi, \cdot)$  son operadores no acotados, por lo que para evitar las dificultades que conlleva el dominio de definición, es conveniente considerar entonces a los operadores de Weyl,  $W(\phi) = \exp[i\hat{\Omega}(\phi, \cdot)]$ . En tal caso, la representación en  $\mathcal{F}_J$  que se acaba de especificar, corresponde a la de los generadores de  $W(\phi)$  y equivale a una representación unitaria, fuertemente continua e irreducible de las relaciones de Weyl [cf. ecs. (2.8)-(2.9)].

*Representación a la Schrödinger.*

Si se parte del espacio fase canónico  $\Gamma$ , en lugar del covariante  $S$ , las observables fundamentales  $O_0$  son las generadas por combinaciones lineales de la funcional constante  $1(g, f) = 1$  y las observables de configuración y momento,  $\varphi[f] = \Omega((0, f), \cdot)$  y  $\pi[g] = \Omega((-g, 0), \cdot)$ , donde  $(g, f) \in \Gamma$ . El espacio fase  $\Gamma$  es equipado con el producto interno  $\mu(\cdot, \cdot) = \Omega(j \cdot, \cdot)$  [cf. ec. (3.8)], donde  $j \in \mathbb{J}(\Gamma, \Omega)$  tiene la forma general  $j(\varphi, \pi) = (A\varphi + B\pi, C\pi + D\varphi)$ , con  $A, B, C$  y  $D$  operadores lineales que satisfacen las siguientes relaciones

$$A^2 + BD = -I, \quad C^2 + DB = -I, \quad AB + BC = 0, \quad DA + CD = 0, \quad (3.16)$$

que provienen de la condición  $j^2 = -I$ , y

$$\int_{\Sigma} fBf' = \int_{\Sigma} f'Bf, \quad \int_{\Sigma} gDg' = \int_{\Sigma} g'Dg, \quad \int_{\Sigma} fAg = - \int_{\Sigma} gCf, \quad (3.17a)$$

$$\int_{\Sigma} fBf < 0, \quad \int_{\Sigma} gDg > 0, \quad (3.17b)$$

que se siguen del requerimiento de compatibilidad de  $j$  con  $\Omega$ .

La construcción del álgebra  $\mathcal{A}$  define los operadores fundamentales abstractos de configuración y momento,  $\hat{\varphi}[f]$  y  $\hat{\pi}[g]$ , que satisfacen las RCC  $[\hat{\varphi}, \hat{\pi}] = i\Omega((0, f), (g, 0))\hat{I}$  [que son las RCC (3.10) con  $v = (0, f)$  y  $v' = (-g, 0)$ ]. La representación natural de las RCC en espacio de Hilbert es una representación a la Schrödinger; es decir, una representación en la que  $\hat{\varphi}[f]$  y  $\hat{\pi}[g]$  sean representados en el Hilbert  $\mathcal{H}_j = L^2(\bar{C}, d\eta)$ , de funcionales de onda sobre un espacio de configuración cuántico  $\bar{C}$ , por multiplicación y diferenciación. La medida  $d\eta$  es Gaussiana y es determinada por la estructura compleja  $j$ . En general, la medida no contiene toda la información sobre la estructura compleja, parte de la información de  $j$  está codificada también en términos multiplicativos en  $\hat{\pi}[g]$ , que se suman al término de derivada. En concreto, la medida y los operadores de configuración y momento están dados por [10]

$$d\eta = \exp\left(\int_{\Sigma} \varphi B^{-1} \varphi\right) \mathcal{D}\varphi, \quad (3.18)$$

$$\hat{\varphi}[f]\Psi = \varphi[f]\Psi, \quad \hat{\pi}[g]\Psi = -i \int_{\Sigma} \left( g \frac{\delta}{\delta \varphi} + \varphi(B^{-1} + iCB^{-1})g \right) \Psi. \quad (3.19)$$

No es difícil ver que los operadores de configuración y momento (3.19) en  $\mathcal{H}_j$  son, efectivamente, auto-adjuntos y satisfacen las RCC. Si consideramos los operadores de Weyl

$W(g, f) = \exp[i\hat{\Omega}((g, f), \cdot)]$ , donde  $\hat{\Omega}((g, f), \cdot) = \hat{\varphi}[f] - \hat{\pi}[g]$ , para evitar tener que lidiar con los dominios de definición, la representación (3.19) corresponde a la representación de los generadores de  $\mathcal{U}(f) = \exp(i\hat{\varphi}[f])$  y  $\mathcal{V}(g) = \exp(i\hat{\pi}[g])$ , y equivale a una representación unitaria, fuertemente continua e irreducible de las relaciones de Weyl en su versión configuración-momento [cf. ecs. (2.10a,2.10b)-(2.11)].

Las estructuras complejas en  $\Gamma$  y  $S$  están relacionadas isomórficamente; esto ocurre, evidentemente, también para las estructuras complejas compatibles con la estructura simplectica. En efecto, dada una estructura compleja  $j \in \mathbb{J}(\Gamma, \Omega)$ , la estructura compleja correspondiente en  $S$  es  $J = I_{t_0}^{-1} j I_{t_0}$ , donde  $I_{t_0}$  es la biyección entre  $S$  y  $\Gamma$  a un tiempo de referencia inicial  $t_0$ . Las representaciones  $(\mathcal{F}_J, \hat{a}_J(\bar{\chi}), \hat{a}_J^\dagger(\xi))$  y  $(\mathcal{H}_j, \hat{\varphi}[f], \hat{\pi}[g])$ , con  $J = I_{t_0}^{-1} j I_{t_0}$ , son dos realizaciones para la misma representación de las relaciones de Weyl; es decir, la representación a la Fock y la representación a la Schrödinger son unitariamente equivalentes: existe un mapeo unitario  $U : \mathcal{F}_J \rightarrow \mathcal{H}_j$ , con  $U|0\rangle = \Psi_0$ , donde  $|0\rangle$  representa el estado de vacío en  $\mathcal{F}_J$  y  $\Psi_0 \in \mathcal{H}_j$  es la funcional constante uno<sup>10</sup>.

### 3.4. Ambigüedad en la representación

Las representaciones en espacio de Hilbert para el sistema de campo están parametrizadas por las estructuras complejas  $J \in \mathbb{J}(S, \Omega)$ , en el caso covariante, y  $j \in \mathbb{J}(\Gamma, \Omega)$ , en el caso canónico. Esto es, la representación *no es única*, hay tantas representaciones posibles como estructuras complejas compatibles con  $\Omega$ . En virtud de la equivalencia unitaria entre representaciones de Fock y de Schrödinger, mencionada al final del anterior apartado, basta entonces discutir el problema de la no unicidad en cualquiera de las dos representaciones. Aquí discutiremos la no unicidad en la representación de Fock; el análisis es completamente análogo en la de Schrödinger, precisamente por la relación unitaria entre  $(\mathcal{F}_J, \hat{a}_J(\bar{\chi}), \hat{a}_J^\dagger(\xi))$  y  $(\mathcal{H}_j, \hat{\varphi}[f], \hat{\pi}[g])$ , con  $J = I_{t_0}^{-1} j I_{t_0}$ .

Como hemos visto,  $\mathcal{R}_J = (\mathcal{F}_J, \hat{a}_J(\bar{\chi}), \hat{a}_J^\dagger(\xi))$  es la representación en el espacio de Fock asociada a una estructura compleja  $J$  compatible con  $\Omega$ . Con esta especificación concluye el programa de cuantización; sin embargo, es importante notar que éste no está libre de ambigüedad. En efecto, cualquier otra estructura compleja en  $\mathbb{J}(S, \Omega)$ , digamos  $J'$ , proveerá una representación en espacio de Fock,  $\mathcal{R}_{J'} = (\mathcal{F}_{J'}, \hat{a}_{J'}(\bar{\chi}), \hat{a}_{J'}^\dagger(\xi))$ , igualmente válida en términos del programa. Esto es, tenemos un conjunto infinito de posibles representaciones  $R_{\mathcal{F}} = \{\mathcal{R}_J = (\mathcal{F}_J, \hat{a}_J(\bar{\chi}), \hat{a}_J^\dagger(\xi)); J \in \mathbb{J}(S, \Omega)\}$ , y el problema de la ambigüedad radica en el hecho de que en este conjunto hay una infinidad de representaciones *no unitariamente equivalentes*, lo que implica que se tiene una infinidad de teorías cuánticas para el sistema que son físicamente incompatibles. Para terminar el proceso de cuantización es entonces necesario elegir *una* teoría cuántica; es decir, imponer criterios físicos extra<sup>11</sup> que permitan seleccionar *una* (módulo equivalencia) estructura compleja predilecta y, por consiguiente,

---

<sup>10</sup>Para un estudio detallado sobre la relación entre las representaciones de Fock y Schrödinger, véanse [10] y [11].

<sup>11</sup>El o los criterios llevan el calificativo de “extra” en el sentido de que no forman parte del programa de cuantización, sino que son condiciones *extra* que eventualmente deben imponerse para eliminar las ambigüedades inherentes y, con ello, concluir el proceso de cuantización especificando *una* teoría cuántica.

una representación (módulo equivalencia unitaria).

Precisemos de manera más formal el problema de la ambigüedad en la representación en espacio de Hilbert:

Dos representaciones,  $\mathcal{R}_J$  y  $\mathcal{R}_{J'}$  asociadas a  $J, J' \in \mathbb{J}(S, \Omega)$ , son unitariamente equivalentes, es decir existe un mapeo unitario  $U_{(J,J')} : \mathcal{F}_J \rightarrow \mathcal{F}_{J'}$ , sii  $(J - J')$  es un operador Hilbert-Schmidt<sup>12</sup> (HS) en el espacio de Hilbert separable  $\mathcal{H}_J$  (equivalentemente HS en  $\mathcal{H}_{J'}$ ). Entonces, si  $(J - J') \in \text{HS}$  las representaciones  $\mathcal{R}_J$  y  $\mathcal{R}_{J'}$  son físicamente equivalentes, en caso contrario [i.e., si  $(J - J') \notin \text{HS}$ ] no lo son. Sea  $[J]$  la clase de equivalencia de  $J$  formada por todas las estructuras complejas en  $\mathbb{J}(S, \Omega)$  cuya representación asociada es unitariamente equivalente a  $\mathcal{R}_J$ ; esto es,  $J' \in [J]$  (i.e.,  $J' \sim J$ ) si  $(J - J') \in \text{HS}$ . Obviamente si  $J' \in [J]$ , entonces  $J \in [J']$  y es claro que  $[J] = [J']$ . Ahora bien, aunque ciertamente  $[J]$  comprende una infinidad de estructuras complejas, resulta que  $[J]$  es un subconjunto propio de  $R_{\mathcal{F}}$ . De hecho, el conjunto  $R_{\mathcal{F}}$  está conformado por una infinidad de clases de equivalencia de estructuras complejas compatibles con  $\Omega$ . Por construcción, todas las estructuras complejas son igualmente válidas y tenemos entonces el serio problema de contar con una infinidad de posibles teorías cuánticas que no son equivalentes entre sí. Para superar *el problema de unicidad* deben establecerse criterios físicos (tantos como hagan falta) que al imponerse seleccionen, entre la infinidad de posibilidades, una estructura compleja predilecta (una clase) y por tanto una teoría cuántica (módulo equivalencia unitaria).

### Criterios para eliminar la ambigüedad en la representación

Para una mejor comprensión de los criterios que se presentarán, es conveniente discutir primero qué significa la implementación unitaria de transformaciones simplécticas.

Dada una transformación simpléctica  $L : S \rightarrow S$ , ésta induce en el espacio de observables fundamentales el mapeo<sup>13</sup>  $\Omega(\phi, \cdot) \mapsto \Omega(L^{-1}\phi, \cdot)$  que, a su vez, induce el automorfismo  $\alpha_L \cdot \hat{\Omega}(\phi, \cdot) = \hat{\Omega}(L^{-1}\phi, \cdot)$  en el álgebra abstracta de observables  $\mathcal{A}$ . Además, dada una  $J \in \mathbb{J}(S, \Omega)$ , el simplectomorfismo  $L$  induce la estructura compleja  $J_L = L J L^{-1} \in \mathbb{J}(S, \Omega)$ . El automorfismo  $\alpha_L$  es *unitariamente implementable* en  $\mathcal{R}_J$  si existe una transformación unitaria  $U : \mathcal{F}_J \rightarrow \mathcal{F}_J$  tal que  $U^{-1}\hat{\Omega}(\phi, \cdot)U = \alpha_L \cdot \hat{\Omega}(\phi, \cdot)$  para todos los operadores  $\alpha_L \cdot \hat{\Omega}(\phi, \cdot)$  y  $\hat{\Omega}(\phi, \cdot)$  en  $\mathcal{F}_J$ . Es posible mostrar que existe  $U$  unitaria sii  $(J - J_L) \in \text{HS}$  en  $\mathcal{H}_J$ . Por consiguiente, tenemos que una transformación simpléctica  $L : S \rightarrow S$  es *unitariamente implementable* en  $\mathcal{F}_J$  (i.e., es representada por un operador unitario) sii  $(J - J_L) \in \text{HS}$  en  $\mathcal{H}_J$ . Como caso particular está la *invariancia*: si  $J$  y  $L$  comutan, entonces  $J$  es *invariante* ante  $L$ ,  $(J - J_L)$  es trivialmente HS,  $\hat{a}_J = \hat{a}_{J_L}$  y  $\hat{a}_J^\dagger = \hat{a}_{J_L}^\dagger$ , lo que implica que el vacío  $|0\rangle_J$  es *invariante* ante la transformación unitaria inducida por  $L$ .

Si una transformación simpléctica  $L$  no cumple con la condición HS,  $(J - J_L) \notin \text{HS}$ , significa entonces que ésta no es representada cuánticamente por un operador unitario en  $\mathcal{F}_J$ . En contraste con el caso finito, donde genéricamente cualquier transformación simpléctica

---

<sup>12</sup>Sea  $\mathcal{H}$  un espacio de Hilbert separable y  $\{\psi_n\}$  una base ortonormal. Para cualquier operador positivo  $B$  (i.e.,  $B$  lineal, acotado y tal que  $\langle B\psi, \psi \rangle \geq 0$ , para todo  $\psi \in \mathcal{H}$ ), la traza de  $B$  se define como  $\text{tr } B = \sum_n \langle \psi_n, B\psi_n \rangle$ . Un operador  $B$  es llamado Hilbert-Schmidt sii  $\text{tr}(B^\dagger B) < \infty$  [9].

<sup>13</sup>La observable  $\Omega(\phi, \cdot)$  asigna al estado transformado  $\tilde{\phi} \mapsto L\tilde{\phi}$  el valor  $\Omega(\phi, L\tilde{\phi})$ . La observable transformada, inducida por  $L$ , es aquella que asigna el valor  $\Omega(\phi, L\tilde{\phi})$  al estado original  $\tilde{\phi}$ .

es unitariamente implementable, en teoría de campos hay en general (además de las unitariamente implementables) una infinidad de transformaciones simplécticas sin una contraparte unitaria en la teoría cuántica. Es importante señalar que la no implementabilidad de una transformación simpléctica  $L$  en  $\mathcal{F}_J$ , no implica que en cualquier otro  $\mathcal{F}_{J'}$  será también no implementable; esto es, que  $(J - J_L) \notin HS$  en  $\mathcal{H}_J$ , con  $J_L = L J L^{-1}$ , no excluye la posibilidad de que exista una  $J'$  (o una infinidad de estructuras complejas) tal que  $(J' - J'_L) \in HS$  en  $\mathcal{H}_{J'}$ , con  $J'_L = L J' L^{-1}$ .

#### *Criterio de simetría:*

El criterio más socorrido y natural es el de imponer las simetrías espacio-temporales en la representación; es decir, que de todas las estructuras complejas compatibles con  $\Omega$ , se seleccionen sólo aquellas cuya acción en el espacio fase conmute con la acción (inducida en el espacio fase) del grupo de simetrías. Este criterio es físicamente plausible y fija por completo, para el caso plano, a la estructura compleja; es decir, cuando el campo se propaga en el espacio-tiempo de Minkowski, *existe sólo una estructura compleja  $J_p$  invariantante ante el grupo de Poincaré*. El problema de unicidad es, pues, resuelto: la teoría cuántica corresponde a  $\mathcal{R}_{J_p} = (\mathcal{F}_{J_p}, \hat{a}_{J_p}(\bar{\chi}), \hat{a}_{J_p}^\dagger(\xi))$ , que es (módulo equivalencia unitaria) única.

Sin embargo, para sistemas con menos simetrías el criterio es generalmente insuficiente y su aplicación, si bien reduce el conjunto de estructuras complejas posibles, no basta para seleccionar *una* estructura compleja predilecta (módulo equivalencia). En tales casos, deben formularse e imponerse más criterios con significado físico para solucionar el problema de unicidad. Un criterio que ha tenido mucho éxito para resolver el problema de la ambigüedad en la cuantización, en diversos sistemas en los que el criterio de simetría es insuficiente, es el *criterio de implementación unitaria de la dinámica*.

#### *Criterio de implementación unitaria de la dinámica:*

Supongamos que el campo escalar se propaga en un fondo no estacionario, p.ej. un fondo cosmológico de Friedmann-Robertson-Walker (FRW), y que se emplea el criterio de simetría, reduciendo entonces el conjunto de estructuras complejas físicamente viables a aquellas que son invariantes (y  $\Omega$ -compatibles). Genéricamente, la restricción será insuficiente y se tendrá una infinidad de representaciones, no unitariamente equivalentes, invariantes ante las simetrías espaciales. Ahora bien, aunque las estructuras complejas invariantes ante las simetrías espaciales *no son* invariantes ante el grupo de transformaciones simplécticas  $T_{(t,t_0)} = I_{t_0}^{-1} \circ I_t$  que dictan la dinámica clásica (pues el fondo es no estacionario) es razonable imponer que, de entre todas las estructuras complejas invariantes, se admitan sólo a aquellas para las que  $T_{(t,t_0)}$  pueda implementarse unitariamente. El sustento físico para imponer el *criterio de implementación unitaria de la dinámica*, i.e. requerir una implementación unitaria de la evolución, es que la ausencia de una evolución unitaria conlleva la pérdida de conservación en la corriente de probabilidad, que es una noción fundamental para la consistencia de la teoría cuántica en espacio de Hilbert. La implementación unitaria de la dinámica es, sin embargo, sutil: en general no es directa su realización y debe *primero* reformularse el

sistema, para *después* imponer la implementación unitaria de la dinámica. La ruta para llevar a cabo el criterio de implementación unitaria de la dinámica, junto con el de simetría, consiste en reformular el sistema, redistribuyendo la dependencia temporal entre campo y espacio-tiempo –típicamente mediante un reescalamiento del campo que dependa explícitamente del tiempo–, e imponer en el sistema resultante –campo reescalado y fondo efectivo– (a) invariancia ante las simetrías y (b) que la evolución  $\mathcal{T}_{(t,t_0)}$  sea unitariamente implementable –genéricamente no existen estructuras complejas que comuten con  $\mathcal{T}_{(t,t_0)}$ –. Esto es, hallar (si es que existe) una estructura compleja  $J_0$  tal que (a)  $J_0$  commute con las simetrías y (b)  $(J_0 - J_{\mathcal{T}}) \in \text{HS}$  en  $\mathcal{H}_{J_0}$ , con  $J_{\mathcal{T}} = \mathcal{T}_{(t,t_0)} J_0 \mathcal{T}_{(t,t_0)}^{-1}$ , para toda  $t$  (i.e.,  $J_{\mathcal{T}} \in [J_0]$ ).

La aplicación del criterio de implementación unitaria de la dinámica, en conjunto con el de simetría, ha tenido gran éxito para eliminar la ambigüedad en la representación de diversos sistemas, proveyendo *una* cuantización predilecta (módulo equivalencia unitaria), completa y consistente. El criterio ha sido empleado con resultados favorables en la cuantización de modelos cosmológicos de Gowdy, en la cuantización de un campo de Klein-Gordon sujeto a un potencial dependiente del tiempo cualquiera (pero cuadrático) en un fondo espacialmente compacto ( $\Sigma$  cualquier variedad Riemanniana compacta) de dimensión menor o igual a tres, así como para resolver el problema de unicidad en la cuantización de un campo escalar propagándose en un fondo de Sitter, en espacio-tiempos cosmológicos de FRW y en un fondo anisotrópico de Bianchi I (para todos estos casos ver [3] y las referencias ahí citadas). También a permitido determinar *una* cuantización privilegiada para el caso de un campo escalar en el interior de un agujero negro [12, 13]. De igual manera, el criterio ha sido empleado con gran éxito para eliminar la ambigüedad en la representación de las RAC (Relaciones de Anticonmutación Canónicas) para campos de Dirac (ver [14] y las referencias ahí contenidas). El estudio del criterio de implementación unitaria de la dinámica, y en general el estudio de la unicidad en la cuantización, es una línea de investigación vigente y de interés en áreas como Teoría Cuántica de Campos en Fondos Curvos, Cosmología Cuántica y Gravedad Cuántica.

## Referencias

- [1] A. Ashtekar y R.S. Tate, “An algebraic extension of Dirac quantization: Examples”, *J. Math. Phys.* **35**, 6434-6470 (1994).
- [2] R. Geroch, *Mathematical Physics* (The University of Chicago Press, 1985).
- [3] J. Cortez, G. A. Mena Marugán y J. Velhinho, “Quantum Linear Scalar Fields with Time Dependent Potentials: Overview and Applications to Cosmology”, *Mathematics* **8**, 115 (2020).
- [4] A. Ashtekar y A. Magnon, “Quantum fields in curved space-times”, *Proc. R. Soc. Lond. A*, 346 (1975).
- [5] A. Ashtekar y A. Magnon-Ashtekar”, “A curiosity concerning the role of coherent states in quantum field theory”, *Pramana* **15**, 107 (1980).

- [6] E.J. Saletan y J.V. José, *Classical Dynamics: A Contemporary Approach* (Cambridge University Press, 1998).
- [7] R. M. Wald, *Quantum Field Theory in Curved Spacetime and Black Hole Thermodynamics* (The University of Chicago Press, 1994).
- [8] C. R. Putnam, *Commutation Properties of Hilbert Space Operators and Related Topics* (Springer. Berlin, 1967).
- [9] M. Reed y B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics*, vol. I: Functional Analysis (Academic Press, 1980).
- [10] A. Corichi, J. Cortez y H. Quevedo, “Schrödinger representation for a scalar field on curved spacetime”, Phys. Rev. D **66**, 085025 (2002).
- [11] A. Corichi, J. Cortez y H. Quevedo, “Schrödinger and Fock representation for a field theory on curved spacetime”, Annals Phys. **313**, 446–478 (2004).
- [12] J. Cortez, B. Elizaga Navascués, G. A. Mena Marugán, A. Torres-Caballeros y J.M. Velhinho, “Fock Quantization of a Klein–Gordon Field in the Interior Geometry of a Nonrotating Black Hole”, Mathematics **11**, 3922 (2023).
- [13] J. Cortez, G. A. Mena Marugán, A. Torres-Caballeros y J. M. Velhinho, “Time-dependent scalings and Fock quantization of a massless scalar field in Kantowski–Sachs”, Class. Quant. Grav. **41**, 195002 (2024).
- [14] 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).

# Introducción a los qubits superconductores

---

**Carlos A. González-Gutiérrez<sup>1,†</sup>, Montserrat Córdova-Ríos<sup>1,2</sup>, Anahí Olmedo-Rodríguez<sup>1,3</sup>, Luis M. Bustamante-Vargas<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México*

<sup>2</sup>*Centro de Investigación en Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos*

<sup>3</sup>*Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de San Luis Potosí*

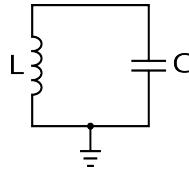
*E-mail:* [†carlosgg@icf.unam.mx](mailto:carlosgg@icf.unam.mx)

**ABSTRACT:** Estas memorias son el resultado de la charla: “*Átomos artificiales para información cuántica*” presentada en la XXXI escuela de verano en Física de la UNAM en 2024. Se presenta una breve introducción al campo de los circuitos cuánticos superconductores. En particular, a los fundamentos y conceptos básicos de uno de los qubits más populares actualmente, el *transmon*.

## 1. Introducción

Es común entre los físicos asociar a la mecánica clásica con sistemas macroscópicos y a la mecánica cuántica con sistemas microscópicos. Alrededor de 1980 algunos físicos se preguntaban si era posible observar efectos cuánticos, como el efecto túnel y la cuantización de niveles de energía a una escala macroscópica. La respuesta la encontraron en la superconductividad, un fenómeno cuántico que se manifiesta en cantidades macroscópicas medibles como la corriente eléctrica, la cual puede fluir sin disipación en ciertos materiales por debajo de cierta temperatura crítica. El primer sistema que se exploró experimentalmente consistía de una unión de Josephson, formada por una barrera muy delgada de material aislante en medio de dos superconductores. El primer efecto cuántico observado fue el tunelamiento del grado de libertad de fase e inmediatamente después encontraron que la energía asociada al mismo grado de libertad estaba cuantizada. En este punto surgió cierto interés en caracterizar y controlar sistemas más simples que consistían solo de dos estados. A finales de los 90's se propuso la implementación de qubits superconductores en estos sistemas, lo que conllevó al primer experimento con un qubit superconductor, reportado en 1999 [1]. De manera paralela a los avances experimentales con las uniones de Josephson, en la comunidad de física atómica y óptica cuántica se estaban desarrollando otras arquitecturas para el estudio de interacciones coherentes entre átomos individuales y radiación atrapada en cavidades. Estas ideas también permearon en la comunidad del estado sólido y a principios de los 2000 se empezaron los esfuerzos por explorar la misma física que en cavidades, pero ahora con circuitos y uniones de Josephson, acoplando qubits superconductores a fotones de microondas en cavidades tridimensionales. Esto abrió todo un mundo de posibilidades, no solo para explorar la interacción radiación-materia en regímenes desconocidos, sino también para explotar estos sistemas para el procesamiento de información cuántica en general. Es entonces así como surge el campo de la electrodinámica cuántica de circuitos superconductores, la cual combina herramientas teóricas y experimentales de la física atómica, la óptica cuántica y la física de sistemas mesoscópicos superconductores, con la ventaja adicional de tener un impacto tecnológico prometedor. Hoy en día, los qubits basados en esta arquitectura son pioneros en la computación cuántica. Grandes compañías tecnológicas como Google e IBM han escogido esta plataforma para lograr alcanzar el sueño de la supremacía cuántica, según la cual una computadora cuántica logra realizar una tarea que sería imposible lograr para la computación que empleamos en la actualidad.

Estas notas son sólo una breve y superficial introducción a los circuitos cuánticos superconductores y los modelos fundamentales para llegar a la obtención del transmon qubit y sus operaciones unitarias básicas. Este es quizá el qubit más popular realizado hasta la fecha y en el que se basan la mayoría de las propuestas modernas para computación cuántica. Casi todo el material presentado en estas notas está basado principalmente en los excelentes reviews de A. Blais [2] y S. E. Rasmussen [3]. Recomendamos también a los y las lectoras revisar el libro de J. J. García-Ripoll [4], para una discusión más detallada de los temas y detalles técnicos importantes. Es importante destacar que la información en español sobre estos temas es escasa, por lo que nos complace aportar, a través de estas



**Figura 1.** Diagrama eléctrico de un circuito  $LC$

memorias, a reducir esta brecha de conocimiento.

## 2. Descripción cuántica de un oscilador $LC$

En la literatura de circuitos eléctricos, es común usar una descripción simplificada de los componentes de dicho circuito para facilitar su tratamiento matemático. En esta descripción, se asume que el tamaño de los elementos principales de dicho circuito eléctrico es pequeño en comparación con la longitud de onda asociada. En esta descripción, un circuito  $LC$  se puede representar mediante el diagrama de la figura 1.

Un oscilador  $LC$  es análogo a un oscilador mecánico, caracterizado por su inductancia  $L$  y su capacitancia  $C$ , o de manera equivalente, por su frecuencia  $\omega = \sqrt{1/LC}$  o su impedancia  $Z = \sqrt{L/C}$ . La energía total de un circuito  $LC$  está dada por:

$$H_{LC} = \frac{Q^2}{2C} + \frac{C\omega^2}{2}\Phi^2, \quad (2.1)$$

donde  $Q$  es la carga eléctrica almacenada en el capacitor y  $\Phi$  es el flujo magnético a través del inductor. La carga se puede obtener de la corriente del circuito a través de  $Q(t) = \int_0^t dt' I(t')$ . Asimismo, la ley de inducción de Faraday nos permite relacionar el flujo con el voltaje:  $\Phi(t) = \int_0^t dt' V(t')$ . El Hamiltoniano (2.1) es idéntico al de un oscilador armónico mecánico con coordenada  $\Phi$ , momento conjugado  $Q$  y masa  $C$ . Ahora uno se puede plantear las siguientes preguntas:

1. ¿Es posible cuantizar el circuito  $LC$  de la misma forma que lo hacemos con un oscilador mecánico? Por supuesto que sí. Desde un punto de vista puramente matemático no hay nada que nos impida cuantizar un oscilador eléctrico de la misma forma que lo hacemos con uno mecánico. Para cuantizar el circuito lo que hacemos es promover las variables clásicas  $\Phi$  y  $Q$  a operadores  $\hat{\Phi}$  y  $\hat{Q}$ , las cuales satisfacen la relación de commutación canónica:

$$[\hat{\Phi}, \hat{Q}] = i\hbar. \quad (2.2)$$

En analogía con el oscilador mecánico introducimos los operadores de destrucción  $\hat{a}$  y creación  $\hat{a}^\dagger$  de la siguiente forma:

$$\hat{\Phi} = \sqrt{\frac{\hbar Z}{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{Q} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2Z}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}). \quad (2.3)$$

El Hamiltoniano clásico (2.1) puede ahora cuantizarse en términos de los anteriores operadores como,

$$\hat{H}_{LC} = \hbar\omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2). \quad (2.4)$$

Los eigenestados del circuito cuántico  $LC$  satisfacen la relación  $\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle$ , siendo  $n = 0, 1, 2, \dots$  el número de excitaciones cuantizadas. En éste caso la acción del operador  $\hat{a}^\dagger(\hat{a})$  es crear (destruir) una excitación cuantizada asociada a los grados de libertad de flujo y carga del oscilador  $LC$ .

2. ¿Puede un circuito  $LC$ , siendo este un sistema macroscópico, manifestar efectos cuánticos observables?

Sorprendentemente, la respuesta a esta segunda pregunta es afirmativa si las siguientes dos condiciones se satisfacen:

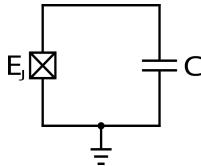
1. El circuito  $LC$  debe estar suficientemente aislado de perturbaciones externas, de tal forma que el ancho de sus niveles de energía sea bastante menor que su separación.
2. La separación de energía entre niveles consecutivos de energía debe ser mayor que la energía térmica:  $\hbar\omega \gg k_B T$ .

La primera condición implica que el factor de calidad del oscilador, definido como  $Q = \omega/\kappa$ , es un número grande, donde  $\kappa$  es el ancho de niveles de energía del oscilador y se puede relacionar con la tasa de pérdida de los fotones. Disminuir estas pérdidas es entonces fundamental para alcanzar altos factores de calidad. Una solución a este problema lo proveen los materiales superconductores, los cuales disminuyen de manera dramática el efecto de las pérdidas, alcanzando factores de calidad del orden de  $Q \sim 10^3 - 10^8$ . La segunda condición es un poco más complicada de satisfacer desde el punto de vista técnico. Afortunadamente, la tecnología de los refrigeradores de dilución puede ser aprovechada para enfriar dichos circuitos por debajo de los 50 mK. Típicamente, los materiales superconductores que se emplean tienen temperaturas críticas en el rango de 1 – 10 K, lo cual asegura su estado superconductor en los refrigeradores de dilución.

Dado que se puede cumplir con los requerimientos anteriores, un circuito  $LC$  con frecuencia de resonancia en el rango de las microondas puede, en principio, alcanzar el régimen cuántico. Es decir, sus niveles de energía estarán cuantizados y separados por una cantidad igual a  $\hbar\omega$ . Una vez en el régimen cuántico, puede alcanzar su estado base esperando el tiempo suficiente para que cualquier excitación decaiga al estado  $|0\rangle$ .

### 3. Átomos artificiales con circuitos superconductores

De nuestra discusión anterior podemos concluir que cualquier sistema cuántico que se comporte como un oscilador se puede simular usando un circuito  $LC$  superconductor operando a bajas temperaturas. Surge entonces la pregunta natural de si podríamos ir más lejos y simular sistemas más allá del oscilador armónico. Por ejemplo, sistemas anarmónicos. De nuevo, la respuesta es afirmativa. Es posible simular sistemas anarmónicos (con niveles de energía no equidistantes entre sí) usando circuitos superconductores. Sin embargo, nuestra discusión en esta sección se centrará en el uso de circuitos  $LC$  no lineales para la implementación de quantum bits o *qubits*. En información y computación cuántica los qubits



**Figura 2.** Diagrama eléctrico de un circuito  $LC$  no lineal, caracterizado por su energía de Josephson  $E_J$ .

son las unidades básicas de información y por lo tanto son la base de toda la lógica basada en las leyes de la mecánica cuántica. Veremos que un qubit, que no es mas que un sistema cuántico de dos estados, se puede codificar en los estados mas bajos de un circuito  $LC$  no lineal. La razón fundamental por la que necesitamos introducir efectos no lineales es que si consideramos los estados base y primer estado excitado de un circuito  $LC$  como los niveles de un qubit, al estar el segundo estado excitado a la misma distancia energética que del base al primero, se hará difícil distinguir transiciones entre el base y el primero y el primero y el segundo. Por esta razón, un oscilador lineal no se puede emplear para codificar qubits. Para introducir efectos no lineales en nuestro circuito  $LC$ , aprovechamos otro fenómeno de la superconductividad llamado efecto Josephson. Este efecto nos permite introducir una unión o juntura de dos cables superconductores separados por un aislante. En 1962 Brian Josephson demostró que incluso en presencia de esta capa delgada de aislante se produce una corriente superconductora entre los dos superconductores separados. La expresión para dicha corriente se puede expresar en términos del flujo magnético a través de la siguiente relación:

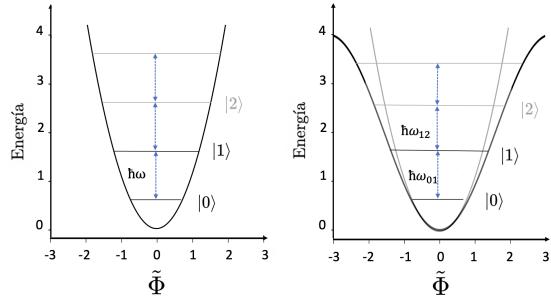
$$I = I_c \sin \left( 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad (3.1)$$

donde  $I_c$  es la corriente crítica de Josephson, por encima de la cual se pierde el efecto coherente de tunelamiento de pares de Cooper y  $\Phi_0 = h/2e$  es el cuanto de flujo magnético. Note que en este caso la corriente  $I(\Phi)$  es una función no lineal del flujo, lo cual contrasta con la relación  $I = \Phi/L$  que teníamos en el oscilador lineal. Este hecho nos permite definir una inductancia efectiva dependiente del flujo:

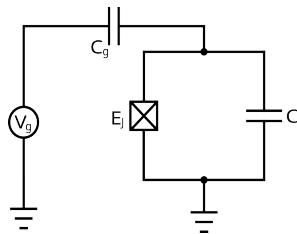
$$L_J(\Phi) = \left( \frac{\partial I}{\partial \Phi} \right)^{-1} = \frac{\Phi_0}{2\pi I_c} \frac{1}{\cos(2\pi\Phi/\Phi_0)}. \quad (3.2)$$

El hecho de que la inductancia anterior dependa de forma no lineal con el flujo, clasifica las uniones o junturas de Josephson como inductores no lineales. Ahora podemos reemplazar al inductor lineal en la descripción del circuito  $LC$  estándar, por una unión de Josephson. El correspondiente diagrama del circuito se muestra en la figura 2. Para apreciar cual es el efecto de introducir la unión de Josephson sobre los niveles de energía del oscilador  $LC$ , podemos calcular la forma de la energía potencial debido a ésta. Basta con recordar que la energía se puede obtener a través de la integral en el tiempo de la potencia, la cual es el producto de la corriente en la Ec. (3.1) por el voltaje. Esto es,

$$E = \int dt I(t)V(t) = I_c \int dt \sin \left( 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \frac{d\Phi}{dt} = -E_J \cos \left( 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \right), \quad (3.3)$$



**Figura 3.** Izquierda) Potencial armónico del circuito  $LC$ . Derecha) Potencial cosenoidal (anarmónico) cuando se introduce la unión de Josephson.



**Figura 4.** circuito  $LC$  no lineal acoplado a una fuente de voltaje externa  $V_g$ .

donde  $E_J = \Phi_0 I_c / 2\pi$ , es la llamada energía de Josephson. El nuevo potencial, dado por la energía del inductor no lineal es ahora un potencial con forma de coseno y no parabólico como en el caso del  $LC$  lineal. Este tipo de potenciales rompe con la equidistancia de los niveles de energía, ya que su frecuencia depende de ésta. De allí el origen del término potencial anarmónico. Esto se ilustra en la figura 3.

Ahora podemos escribir el Hamiltoniano cuantizado total de un oscilador  $LC$  no lineal como:

$$\hat{H}_{L_J} = \frac{(\hat{Q} - Q_g)^2}{2C_{\Sigma}} - E_J \cos\left(2\pi \frac{\hat{\Phi}}{\Phi_0}\right). \quad (3.4)$$

Al escribir el Hamiltoniano anterior, hemos acoplado nuestro circuito a una fuente de voltaje externa, la cual podemos controlar a nuestro antojo, a este voltaje externo lo denominamos  $V_g$ , como se puede apreciar en la figura 4.  $C_{\Sigma} = C_J + C$  es la capacitancia equivalente del circuito y  $Q_g$  la carga correspondiente a la fuente de voltaje externo. Resulta mas conveniente reescribir el Hamiltoniano anterior en términos del operador de número de carga  $\hat{n} = \hat{Q}/2e$  que cuenta el número de pares de Cooper. De esta manera tenemos que,

$$\hat{H}_{L_J} = 4E_C(\hat{n} - n_g)^2 - E_J \cos\left(2\pi \frac{\hat{\Phi}}{\Phi_0}\right), \quad (3.5)$$

donde hemos definido la energía de carga  $E_C = e^2/2C_{\Sigma}$ . El Hamiltoniano (3.5) depende esencialmente de dos parámetros, la energía de carga  $E_C$  y la energía de Josephson  $E_J$ . Si queremos analizar el efecto de variar estos parámetros en el espectro del sistema, debemos

expresar el Hamiltoniano anterior en una base conveniente. Por comodidad, podemos elegir la base número de carga  $\{|n\rangle\}$ . El primer término se expresa de manera muy fácil, ya que los estados de número de carga son eigenestados del operador  $\hat{n}$ . Para el segundo término debemos conocer como se expresa el operador  $\hat{\Phi}$  en la base de carga. Esto se puede ver más directamente pensando en el caso mecánico de los operadores  $\hat{\Phi}$  y  $\hat{Q}$ , los cuales son análogos a las variables canónicas de posición momento. Sabemos que estas últimas están relacionadas mediante una transformada de Fourier, por lo tanto podemos esperar que la base de número de carga y la de flujo se encuentren relacionadas mediante una relación similar. Veamos como actúa el operador  $e^{i\hat{\Phi}}$  con  $\hat{\Phi} = 2\pi\hat{\Phi}/\Phi_0$  sobre un estado de la base de número de carga:

$$e^{i\hat{\Phi}}|n\rangle = \frac{1}{2\pi} \int d\tilde{\Phi}' e^{i\tilde{\Phi}'} |\tilde{\Phi}'\rangle \langle \tilde{\Phi}'|n\rangle = \frac{1}{2\pi} \int d\tilde{\Phi}' e^{i\tilde{\Phi}'(n+1)} |\tilde{\Phi}'\rangle = |n+1\rangle. \quad (3.6)$$

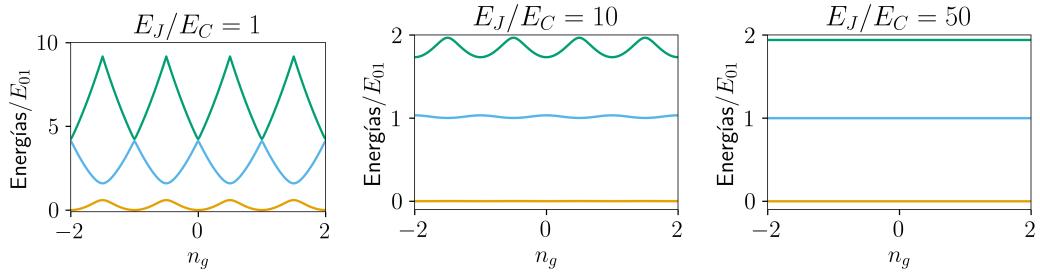
Vemos entonces que el operador anterior actúa como un operador escalera en la base de número de carga. Escribiendo el operador  $\cos(\hat{\Phi}) = (e^{i\hat{\Phi}} + e^{-i\hat{\Phi}})/2$ , podemos escribir el Hamiltoniano (3.5) de la siguiente forma:

$$\hat{H}_{L_J} = 4E_C \sum_n (n - n_g)^2 |n\rangle \langle n| - \frac{E_J}{2} \sum_n (|n+1\rangle \langle n| + |n\rangle \langle n+1|). \quad (3.7)$$

Note que el término de tunelamiento de los pares de Cooper es ahora mucho más claro de interpretar, ya que el operador  $|n+1\rangle \langle n|$  representa la transferencia coherente de un par de Cooper de un lado de la unión hacia el otro. Hemos llegado al punto donde podemos diagonalizar el Hamiltoniano del circuito no lineal y encontrar sus eigenenergías. De la Ec. (3.7) es claro que la matriz que representa a este Hamiltoniano es una matriz tridiagonal, la cual se puede diagonalizar numéricamente usando alguna subrutina en algún lenguaje de programación de preferencia. En la figura 5 mostramos las tres primeras eigenenergías del Hamiltoniano (3.7) como función del número de carga externo  $n_g$  e incrementando el cociente  $E_J/E_C$ . Cuando  $E_J/E_C$  es pequeño, los niveles de energía son altamente sensibles a las variaciones de carga. A medida que este se incrementa dichos niveles se “aplanan” y ya no varían con  $n_g$ . El límite  $E_J/E_C \gg 1$  se le conoce como el régimen del *transmon*. En este punto, tenemos un sistema que es robusto ante fluctuaciones de carga pero que sigue manteniendo su no linealidad, ya que los niveles de energía siguen siendo no equidistantes. Debido a que la carga y el flujo son variables canónicas conjugadas, estas deben satisfacer el principio de incertidumbre de Heisenberg. En el régimen de transmon ( $E_J/E_C \gg 1$ ) la varianza de la carga es grande (la carga se encuentra deslocalizada) y por lo tanto la varianza del flujo debe ser pequeña (flujo localizado). En este caso podemos aproximar el Hamiltoniano (3.5) manteniendo la primera corrección no lineal del coseno,

$$\hat{H}_{L_J} \approx 4E_C \hat{n}^2 + \frac{E_J}{2} \hat{\Phi}^2 - \frac{E_J}{4} \hat{\Phi}^4. \quad (3.8)$$

Vemos que los dos primeros términos dan lugar al espectro lineal del oscilador armónico y el tercero da cuenta de la primera contribución anarmónica en el régimen de transmon.



**Figura 5.** Eigenenergias del Hamiltoniano (3.7) como función del numero carga externo  $n_g$ . De izquierda a derecha incrementamos el cociente  $E_J/E_C$ .

Si introducimos ahora operadores de creación y destrucción como lo hicimos en el caso armónico, tenemos que,

$$\begin{aligned}\hat{\Phi} &= \left(\frac{2E_C}{E_J}\right)^{1/4} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \\ \hat{n} &= \frac{i}{2} \left(\frac{E_J}{2E_C}\right)^{1/4} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}),\end{aligned}\quad (3.9)$$

con lo cual llegamos a una expresión aproximada y bastante conveniente para describir un circuito *LC* no lineal en el régimen de transmon:

$$\hat{H}_{L_J} = \hbar\tilde{\omega}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \frac{E_C}{2}\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}, \quad (3.10)$$

donde  $\hbar\tilde{\omega} = \sqrt{8E_C E_J} - E_C$ .

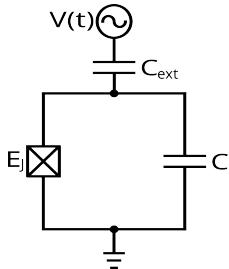
Hasta aquí hemos logrado nuestro objetivo de introducir efectos no lineales de tal forma que al manipular nuestro sistema con una fuente externa no tengamos fuga o probabilidad de excitar otros estados mas energéticos, los hemos puesto fuera de resonancia. Para hablar ahora del transmon qubit tenemos que restringir nuestro estudio a describir los dos primeros niveles de energía del Hamiltoniano. Al hacer esto, podemos directamente reemplazar los operadores bosónicos  $\hat{a}^\dagger$  y  $\hat{a}$  por operadores escalera  $\hat{\sigma}^+$  y  $\hat{\sigma}^-$  en el espacio de dos dimensiones, lo cual conlleva a escribir (excepto por una constante aditiva),

$$\hat{H}_{L_J} = \frac{\hbar\tilde{\omega}}{2}\hat{\sigma}^z, \quad (3.11)$$

con el operador de Pauli  $\hat{\sigma}^z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$ .

#### 4. Computación cuántica con circuitos superconductores

Una de las razones fundamentales para emplear circuitos cuánticos superconductores es su potencial para la implementación del computo cuántico. De allí que las grandes compañías de tecnología que lideran la carrera por la computación cuántica le apuesten a esta arquitectura para basar su tecnología. En esta sección veremos los principios básicos detrás de la implementación de las compuertas cuánticas básicas que se aplican sobre uno y dos transmon qubits.



**Figura 6.** Transmon qubit acoplado a una fuente de voltaje externa  $V(t)$ .

#### 4.1. Compuertas de un qubit

Una de las ventajas de los circuitos superconductores es la implementación de alta fidelidad de operaciones lógicas sobre los qubits. Las compuertas u operaciones de un qubit son simplemente rotaciones arbitrarias sobre la esfera de Bloch de un qubit. Para lograr estas rotaciones se aplican pulsos de microondas sobre los circuitos, como se ilustra en el diagrama de la figura 6 a través de una fuente de voltaje externa dependiente del tiempo  $V(t)$ . el Hamiltoniano de dicho circuito, restringido a los dos niveles mas bajos se puede escribir en la siguiente forma:

$$\hat{H}_q = \hbar\omega_q \hat{\sigma}^z + \hbar\Omega V(t) \hat{\sigma}^y, \quad (4.1)$$

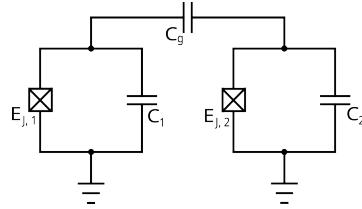
donde  $\omega_q$  y  $\Omega$  son la frecuencia del qubit y la frecuencia de Rabi, respectivamente. Naturalmente estas frecuencias dependen enteramente de los parámetros eléctricos del circuito. el Hamiltoniano anterior se puede transformar a un marco de referencia que rota con la frecuencia  $\omega_q$  del qubit, lo cual resulta en

$$\hat{H}_q^{\text{rotado}} = \hbar\Omega V(t) [\cos(\omega_q t) \hat{\sigma}^y - \sin(\omega_q t) \hat{\sigma}^x]. \quad (4.2)$$

Si el voltaje se escoge como  $V(t) = V_0(t) \sin(\omega_{\text{ext}} t + \phi)$  y se eliminan los términos que oscilan con una frecuencia muy alta, podemos escribir el Hamiltoniano del transmon qubit con excitación externa como:

$$\hat{H}_q^{\text{rotado}} = -\frac{\hbar}{2}\Omega V_0(t) [e^{-i(\delta t - \phi)} \hat{\sigma}^+ + \text{h.c.}], \quad (4.3)$$

donde hemos definido  $\delta = \omega_q - \omega_{\text{ext}}$  como la desintonía entre la frecuencia del qubit y la fuente externa. Podemos ver que si aplicamos un pulso exactamente a la frecuencia del qubit podremos generar rotaciones del vector de estado alrededor de la esfera de Bloch. Si  $\phi = 0$  el Hamiltoniano resultante es proporcional a  $\hat{\sigma}^x$  y genera rotaciones al rededor del eje  $x$  en la esfera de Bloch, y si  $\phi = \pi/2$  de la misma forma se pueden generar rotaciones alrededor del eje  $y$ . No hemos mencionado nada acerca de la forma del pulso externo,  $V_0(t)$ , pero también se puede jugar con éste para realizar una implementación más eficiente de las rotaciones. Ahora sólo nos queda encontrar la manera de generar rotaciones alrededor del eje  $z$ . Una de las formas de generar estas rotaciones es a partir de pulsos no resonantes. Estos pulsos introducen un corrimiento Stark de manera temporal, el cual causa un cambio de fase. Resulta que este cambio de fase corresponde exactamente a una rotación alrededor del eje  $z$ .



**Figura 7.** Dos transmon qubits acoplados capacitivamente a través de  $C_g$ .

#### 4.2. Compuertas de dos qubits

Para generar operaciones unitarias sobre dos transmon qubits debemos conocer el Hamiltoniano más básico que describe la interacción de dos qubits superconductores. La manera más sencilla de acoplar dichos circuitos es a través de un acoplamiento capacitivo (por medio de un capacitor), como se ilustra en la figura 7. El Hamiltoniano que describe dicha interacción esta dado por,

$$\hat{H}_{2q} = \hbar g(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + \text{h.c.}), \quad (4.4)$$

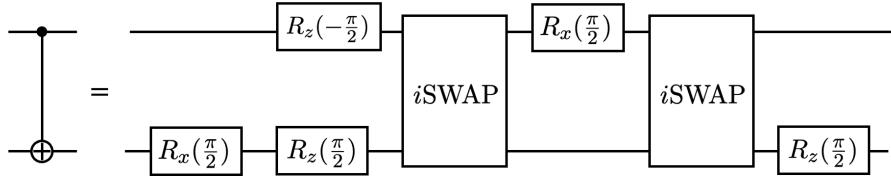
donde  $g = C_g/2C_\Sigma\sqrt{\zeta_1\zeta_2}$ , con  $\zeta_{1,2} = \sqrt{4E_{C_{1,2}}/(E_{L_{1,2}} + E_{J_{1,2}}/2)}$ . El Hamiltoniano anterior, una vez nos restringimos a los dos primeros niveles, da lugar al operador de evolución:

$$\hat{U} = \exp [-igt(\hat{\sigma}_1^+ \hat{\sigma}_2^- + \text{h.c.})]. \quad (4.5)$$

Si nos fijamos al tiempo  $gt = \pi/2$ , la dinámica intrínseca de los circuitos acoplados genera una operación unitaria idéntica a la de una compuerta *iSWAP*:

$$\hat{U}(gt = \pi/2) = i\text{SWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (4.6)$$

Esta compuerta intercambia los estados de los qubits y multiplica las fases de los estados  $|01\rangle$  y  $|10\rangle$  por el factor  $i$ . Pero, ¿Por qué es importante poder generar esta compuerta? Una de las compuertas mas importantes en información y computación cuántica es la compuerta CNOT, la cual es una operación que genera entrelazamiento cuántico. Resulta que dicha compuerta CNOT se puede generar a través de la composición de compuertas *iSWAP* y rotaciones de un qubit. El circuito cuántico (aquí la palabra circuito se emplea en el sentido de computación cuántica, como una secuencia de operaciones unitarias) que lo ilustra se muestra en la figura 8. Una vez que sabemos como implementar una compuerta CNOT, en principio, tenemos todas las herramientas para realizar computación cuántica usando qubits superconductores. Esto es debido al siguiente resultado de universalidad: “*cualquier compuerta que actúe sobre múltiples qubits se puede descomponer como el producto de compuertas CNOT y rotaciones de un solo qubit*”. Por lo tanto, hemos descrito los ingredientes básicos para la computación cuántica usando transmon qubits.



**Figura 8.** Equivalencia entre la compuerta CNOT y rotaciones de un solo qubit + *i*SWAP. Las operaciones  $R_{x,z}(\theta)$  indican rotaciones al rededor de  $x$  o  $z$  por un ángulo  $\theta$ .

## 5. Conclusiones

Estas notas han introducido los fundamentos de los circuitos cuánticos superconductores y su papel en la computación cuántica. Discutimos la cuantización del circuito *LC*, la implementación del transmon como qubit y la realización de compuertas cuánticas básicas. Gracias a su alta fidelidad y escalabilidad, los transmon qubits son elementos clave en el desarrollo de procesadores cuánticos modernos.

## Agradecimientos

C. A. G-G agradece el apoyo de la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) a través del proyecto CBF2023-2024-2888 y de UNAM-PAPIIT IA104625.

## Referencias

- [1] Y. Nakamura, Yu. A. Pashkin, and J. S. Tsai. Coherent control of macroscopic quantum states in a single-cooper-pair box. *Nature*, 398(6730):786–788, Apr 1999.
- [2] Alexandre Blais, Arne L. Grimsmo, S. M. Girvin, and Andreas Wallraff. Circuit quantum electrodynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 93:025005, May 2021.
- [3] S.E. Rasmussen, K.S. Christensen, S.P. Pedersen, L.B. Kristensen, T. Bækkegaard, N.J.S. Loft, and N.T. Zinner. Superconducting circuit companion—an introduction with worked examples. *PRX Quantum*, 2:040204, Dec 2021.
- [4] Juan José García Ripoll. *Quantum Information and Quantum Optics with Superconducting Circuits*. Cambridge University Press, 2022.

# Fundamentos y Aplicaciones de Espectroscopía Desde el Infrarrojo Medio Hasta los Rayos X

Dr. Antonio Marcelo Juárez Reyes<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, correo amjuarez@icf.unam.mx

December 2, 2024

## Abstract

La espectroscopía desde el infrarrojo medio hasta los rayos X es una herramienta clave en ciencia de materiales, biomedicina y ciencias ambientales. Permite la caracterización molecular avanzada para el diseño de materiales funcionales, diagnósticos médicos precisos y estrategias sostenibles frente a la contaminación y el cambio climático.

Su futuro promete avances integrados con inteligencia artificial, miniaturización y fuentes avanzadas de radiación, abriendo nuevas fronteras en investigación interdisciplinaria. Invitamos a estudiantes a explorar estas áreas en el Laboratorio de Fotodinámica Molecular, liderado por el Dr. Antonio M. Juárez, en el Instituto de Ciencias Físicas, UNAM.

## 1 Introducción

La espectroscopía ha sido una herramienta fundamental en el entendimiento de la materia y sus interacciones. Desde sus inicios en el siglo XIX con los experimentos de Fraunhofer, hasta las modernas técnicas basadas en láseres de alta precisión y fuentes de radiación sincrotrón, este campo ha evolucionado significativamente y ha contribuido al desarrollo de un rango amplio de ramas de la ciencia. Concretamente, la región espectral que abarca desde el infrarrojo medio (MIR) hasta los rayos X cubre un amplio rango de aplicaciones científicas e industriales, desde el análisis químico hasta la investigación de materiales y biología estructural. El desarrollo de la espectroscopía en el infrarrojo medio comenzó en el siglo XX con el avance de detectores sensibles, típicamente operados a temperaturas criogénicas, así como por el desarrollo de fuentes infrarrojas estables. Estos avances permitieron estudiar los niveles vibracionales de las moléculas y así caracterizar compuestos químicos. Por otro lado, la espectroscopía de rayos X tuvo sus raíces en el descubrimiento de esta radiación por Wilhelm Röntgen en 1895 y su posterior aplicación al análisis cristalográfico por Laue y los Bragg. El desarrollo de fuentes de luz sincrotrón en la segunda mitad del siglo XX revolucionó el campo al proporcionar intensidades mucho mayores y anchos de banda ajustables. Actualmente, la espectroscopía en el infrarrojo medio se beneficia de tecnologías como los láseres de cascada cuántica (QCLs), que permiten mediciones altamente sensibles y específicas en tiempo real. Este tipo de láseres, que se basan en el uso de heteroestructuras y el confinamiento cuántico

de electrones son empleadas en campos como la detección de gases traza y la caracterización de biomoléculas. En el rango de los rayos X, las modernas fuentes de sincrotrón y láseres de electrones libres (XFELs) han transformado la espectroscopía, permitiendo el estudio de dinámicas ultrarrápidas y estados electrónicos en materiales avanzados. Las técnicas como la espectroscopía de absorción de rayos X (XAS) y la espectroscopía de emisión de rayos X (XES) han sido esenciales para investigar propiedades estructurales y electrónicas en catalizadores, baterías y sistemas biológicos. El futuro de la espectroscopía en el infrarrojo medio está impulsado por avances en integración tecnológica, como sensores basados en nanofotónica y el uso de inteligencia artificial para el análisis de datos. En el rango de rayos X, las nuevas generaciones de fuentes sincrotrón y XFELs prometen intensidades aún mayores, resoluciones temporales en el régimen de attosegundos y acceso a dinámicas electrónicas ultrarrápidas. Además, el desarrollo de técnicas híbridas que combinen espectroscopía y microscopía ofrece la posibilidad de explorar materiales y procesos en entornos operativos reales. Para concluir esta introducción se puede concluir que la espectroscopía desde el infrarrojo medio hasta los rayos X sigue siendo un área de investigación muy activa, con implicaciones fundamentales y aplicadas en múltiples disciplinas. Los avances tecnológicos asociados con la espectroscopía continúan ampliando los límites del conocimiento, ofreciendo herramientas más potentes para abordar los desafíos científicos y tecnológicos del futuro.

## 2 Fundamentos Teóricos

A continuación les comarto, de manera muy suscinta y compacta, algunos de los conceptos y ecuaciones más importantes asociadas con la espectroscopía. Los conceptos no son todos, pero espero que les proporcionen una base para consultar textos especializados sobre el tema.

### 2.1 Fundamentos Teóricos de la Espectroscopía

La espectroscopía es una herramienta fundamental para estudiar la interacción entre la radiación electromagnética y la materia, revelando información sobre la estructura electrónica, vibracional y rotacional de moléculas y sólidos. Sus fundamentos teóricos combinan principios de óptica, mecánica cuántica y termodinámica estadística. A continuación, se describen los conceptos más relevantes.

#### 2.1.1 Ley de Beer-Lambert

La *Ley de Beer-Lambert* establece que la absorbancia  $A$  de una solución es directamente proporcional a la concentración  $c$  de la especie absorbente, al coeficiente de absorción molar  $\varepsilon$ , y a la longitud del camino óptico  $l$  de la radiación:

$$A = \log_{10} \left( \frac{I_0}{I} \right) = \varepsilon cl, \quad (1)$$

donde  $I_0$  es la intensidad inicial de la radiación incidente y  $I$  es la intensidad de la radiación transmitida. Esta ecuación es fundamental en espectroscopía de absorción, ya que permite cuantificar la concentración de una especie a partir de la intensidad medida.

### 2.1.2 Fuerzas de Oscilador

Las *fuerzas de oscilador* describen la probabilidad de transición entre dos estados cuánticos, usualmente en el contexto de absorción o emisión de radiación. La fuerza de oscilador  $f$  se relaciona con la intensidad espectral  $I(\nu)$  y con las propiedades del sistema:

$$f = \frac{2m_e\nu}{3e^2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} |\mu_{fi}(\nu)|^2 d\nu, \quad (2)$$

donde  $m_e$  es la masa del electrón,  $e$  es su carga,  $\nu$  es la frecuencia de la transición,  $\hbar$  es la constante reducida de Planck, y  $\mu_{fi}$  es el momento dipolar de transición entre los estados inicial  $|i\rangle$  y final  $|f\rangle$ . Este parámetro es crucial en espectroscopía atómica y molecular, ya que proporciona una medida de la intensidad relativa de líneas espectrales.

### 2.1.3 Reglas de Selección

Las *reglas de selección* gobiernan qué transiciones son permitidas en un sistema cuántico bajo ciertas aproximaciones. Por ejemplo, en espectroscopía vibracional, las transiciones permitidas dependen del cambio en el momento dipolar del sistema:

$$\Delta\mu \neq 0, \quad (3)$$

lo que significa que debe haber un cambio en el momento dipolar para que una transición sea activa en espectroscopía de infrarrojo. En espectroscopía electrónica, las reglas se derivan del momento angular total:

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta S = 0, \quad (4)$$

donde  $\Delta l$  es el cambio en el momento angular orbital, y  $\Delta S$  es el cambio en el espín electrónico.

### Regla de Oro de Fermi

La *Regla de Oro de Fermi* describe la tasa de transición  $W_{i \rightarrow f}$  entre un estado inicial  $|i\rangle$  y un estado final  $|f\rangle$  debido a una perturbación  $\hat{H}'$ . Se expresa como:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{H}' | i \rangle|^2 \rho(E_f), \quad (5)$$

donde  $\rho(E_f)$  es la densidad de estados en el nivel energético final, y  $\langle f | \hat{H}' | i \rangle$  es el elemento de matriz de la perturbación. Esta fórmula es especialmente relevante en procesos de absorción y emisión espontánea, así como en la interacción de partículas con campos electromagnéticos.

### 2.1.4 Otras Ecuaciones Relevantes

En espectroscopía vibracional y rotacional, las energías de transición están determinadas por las diferencias entre niveles discretos. Por ejemplo, en un oscilador armónico cuántico:

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) h\nu, \quad (6)$$

donde  $n$  es el número cuántico vibracional,  $h$  es la constante de Planck, y  $\nu$  es la frecuencia de vibración. Para sistemas rotacionales, las energías dependen del momento de inercia  $I$ :

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1), \quad (7)$$

donde  $J$  es el número cuántico rotacional. Estas ecuaciones permiten interpretar los espectros vibracionales y rotacionales.

En conjunto, estos fundamentos teóricos proporcionan un marco robusto para comprender la interacción luz-materia, permitiendo extraer información detallada sobre las propiedades físicas y químicas de sistemas de interés.

## 3 Aplicaciones

### 3.1 Aplicaciones de la espectroscopía desde el infrarrojo medio hasta los rayos X en ciencia de materiales

La espectroscopía que abarca desde el infrarrojo medio (MIR) hasta los rayos X ha desempeñado un papel crucial en el desarrollo de la ciencia de materiales. Esta técnica permite investigar la estructura, composición, y propiedades electrónicas de los materiales con alta precisión y resolución. A continuación, se presenta una visión general de su evolución, aplicaciones actuales y proyecciones futuras.

#### 3.1.1 Desarrollo histórico

Desde su desarrollo inicial, la espectroscopía infrarroja y de rayos X ha sido fundamental para entender la estructura molecular y cristalina de materiales. En las décadas de 1950 y 1960, la espectroscopía infrarroja permitió caracterizar enlaces químicos en polímeros y compuestos orgánicos, mientras que los rayos X revolucionaron el estudio de estructuras cristalinas mediante técnicas como la difracción. En las últimas décadas del siglo XX, los avances en fuentes de radiación, como los láseres de cascada cuántica y los sincrotrones, permitieron alcanzar niveles sin precedentes de sensibilidad y resolución.

#### 3.1.2 Estado actual

Hoy en día, las técnicas espectroscópicas en el rango MIR y de rayos X se utilizan ampliamente en ciencia de materiales para:

- **Caracterización química:** La espectroscopía infrarroja es clave para identificar grupos funcionales y enlaces químicos, mientras que la espectroscopía de rayos X permite analizar la composición elemental mediante técnicas como la fluorescencia de rayos X (XRF).
- **Estudio de estructuras electrónicas:** La espectroscopía de absorción de rayos X (XAS) y la espectroscopía de fotoelectrones de rayos X (XPS) proporcionan información detallada sobre estados de oxidación y configuración electrónica.
- **Análisis de defectos y dopantes:** En materiales semiconductores y compuestos avanzados, estas técnicas ayudan a identificar la presencia de defectos cristalinos y dopantes.

- **Estudios dinámicos:** La combinación de espectroscopía MIR y de rayos X con técnicas de ultrarrápidas permite investigar procesos dinámicos como reacciones químicas y cambios de fase en tiempo real.

Además, el desarrollo de fuentes compactas y portátiles de radiación ha ampliado su accesibilidad, permitiendo aplicaciones en industrias como la microelectrónica y la energía renovable.

### 3.1.3 Perspectivas futuras

El futuro de estas técnicas espectroscópicas apunta a una integración más profunda con herramientas computacionales y metodologías avanzadas, como:

- **Machine learning:** La inteligencia artificial se utilizará para interpretar de manera más eficiente los datos espectroscópicos complejos, facilitando la identificación de patrones y correlaciones en materiales multicomponentes.
- **Microscopía espectroscópica:** La combinación de microscopía y espectroscopía permitirá obtener mapas espetrales en 3D con resolución atómica.
- **Nuevas fuentes de radiación:** El desarrollo de fuentes láser de alta potencia y sincrotrones de cuarta generación ampliará las capacidades de resolución temporal y espacial, permitiendo el estudio de fenómenos ultrarrápidos y nanomateriales complejos.
- **Sostenibilidad:** Estas técnicas jugarán un papel esencial en el diseño de materiales sostenibles, como catalizadores para la captura de carbono y baterías de estado sólido de alta eficiencia.

## 3.2 Aplicaciones de la espectroscopía desde el infrarrojo medio hasta los rayos X en biomedicina, biología, imagenología y proteómica

La espectroscopía en el rango del infrarrojo medio (MIR) hasta los rayos X ha transformado la forma en que comprendemos y analizamos sistemas biológicos y biomédicos. Su capacidad para proporcionar información molecular y estructural de manera no invasiva la convierte en una herramienta esencial en biomedicina, biología, imagenología y proteómica. A continuación, se detalla su impacto en estas áreas.

### 3.2.1 Biomedicina: Diagnóstico y terapias avanzadas

En biomedicina, la espectroscopía infrarroja se utiliza para identificar biomarcadores asociados con enfermedades como el cáncer, la diabetes y trastornos neurodegenerativos. La técnica de espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) permite analizar composiciones moleculares en tejidos y fluidos biológicos, diferenciando estados normales y patológicos con alta precisión. Por otro lado, la espectroscopía de rayos X se aplica en la caracterización de tejidos duros, como huesos y dientes, y en el análisis de implantes biomédicos para evaluar su compatibilidad y durabilidad.

Además, técnicas como la espectroscopía de dispersión de rayos X (XRD) han sido clave en la investigación de cristales de fármacos, mejorando su estabilidad y biodisponibilidad. En la terapia, la espectroscopía de absorción de rayos X (XAS) ayuda a monitorear la distribución de metales traza esenciales y tóxicos, contribuyendo al desarrollo de tratamientos personalizados.

### **3.2.2 Biología: Estructura y dinámica molecular**

En biología, estas técnicas proporcionan una ventana única para observar interacciones moleculares a nivel atómico. La espectroscopía de rayos X, empleada junto con cristales macromoleculares, ha sido fundamental para determinar estructuras tridimensionales de proteínas y ácidos nucleicos. Herramientas como la fluorescencia de rayos X (XRF) permiten mapear la distribución de elementos en células, revelando funciones esenciales de metales en procesos metabólicos y enzimáticos.

Por otro lado, la espectroscopía MIR es utilizada para estudiar dinámicas moleculares como los cambios conformacionales de biomoléculas en su entorno nativo. En particular, ha permitido avances en la investigación de proteínas desordenadas intrínsecamente, cuya comprensión es clave para enfermedades como el Alzheimer y el Parkinson.

### **3.2.3 Imagenología: Diagnóstico no invasivo y visualización avanzada**

La integración de la espectroscopía con técnicas de imagenología ha mejorado significativamente las capacidades de diagnóstico no invasivo. En el caso de los rayos X, la tomografía computarizada (CT) espectral permite diferenciar tejidos con base en su composición química, mientras que la tomografía de rayos X de alta resolución (HRCT) proporciona imágenes detalladas de microestructuras óseas y vasculares.

Por su parte, la microscopía infrarroja ha evolucionado hacia aplicaciones *in vivo*, permitiendo la visualización de procesos metabólicos y cambios químicos en tiempo real. Esta técnica es particularmente útil en el monitoreo de terapias, como la respuesta a tratamientos oncológicos.

### **3.2.4 Proteómica: Análisis estructural y funcional de proteínas**

En proteómica, las técnicas espectroscópicas son esenciales para desentrañar estructuras y dinámicas de proteínas y complejos macromoleculares. La espectroscopía de absorción de rayos X (XAS) se utiliza para caracterizar sitios activos en proteínas metaloproteicas, proporcionando información sobre estados de oxidación y geometrías de coordinación.

Además, la espectroscopía MIR combinada con métodos como la dicroísmo circular infrarrojo (IRCD) permite estudiar plegamientos y desnaturalizaciones proteicas. Esto ha facilitado la comprensión de mecanismos moleculares en enfermedades relacionadas con el mal plegamiento de proteínas.

### **3.2.5 Perspectivas futuras**

El desarrollo de fuentes avanzadas de radiación, como los sincrotrones de cuarta generación y láseres de electrones libres (FEL), promete mejorar la resolución espacial y temporal de estas técnicas. En el futuro, se espera que la integración de inteligencia artificial (IA) permita la interpretación automatizada de datos complejos, acelerando descubrimientos en biomedicina y biología.

Asimismo, la miniaturización de equipos espectroscópicos podría llevar estas técnicas a entornos clínicos, facilitando diagnósticos rápidos y personalizados. En proteómica, el uso combinado de espectroscopía ultrarrápida y simulaciones computacionales ofrecerá una comprensión más detallada de procesos biológicos dinámicos, incluyendo medicina personalizada.

### **3.3 Aplicaciones de la espectroscopía desde el infrarrojo medio hasta los rayos X en ciencias ambientales**

La espectroscopía que abarca el rango del infrarrojo medio (MIR) hasta los rayos X ha demostrado ser una herramienta crítica en las ciencias ambientales, proporcionando información fundamental sobre la composición química, procesos dinámicos y transformaciones a nivel molecular en sistemas ambientales. Estas técnicas permiten abordar problemas complejos relacionados con la calidad del aire, agua, suelo, y la sostenibilidad de los recursos naturales. A continuación, se presenta una discusión técnica sobre sus principales aplicaciones.

#### **3.3.1 Monitoreo de contaminantes atmosféricos**

La espectroscopía en el rango MIR se utiliza ampliamente para monitorear gases de efecto invernadero (GEI) como dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), metano ( $\text{CH}_4$ ) y óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x$ ) en la atmósfera. Los láseres de cascada cuántica han permitido medir concentraciones de trazas con alta precisión en tiempo real, siendo una herramienta esencial para estaciones de monitoreo ambiental y estudios de modelado climático.

En el extremo de los rayos X, la espectroscopía de absorción de rayos X (XAS) se emplea para caracterizar partículas suspendidas en el aire, como aerosoles y partículas finas ( $\text{PM}_{2.5}$  y  $\text{PM}_{10}$ ), proporcionando información sobre su composición elemental y origen. Esto es clave para entender los impactos de fuentes antropogénicas como la quema de combustibles fósiles y las actividades industriales.

#### **3.3.2 Evaluación de la calidad del agua**

La espectroscopía infrarroja y de rayos X ha sido fundamental en la caracterización de contaminantes en agua dulce y salada. En el caso del infrarrojo medio, las técnicas de espectroscopía FTIR permiten identificar contaminantes orgánicos como hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs) y microplásticos. Estas técnicas se combinan con análisis espectroscópicos en tiempo real para monitorear derrames de petróleo y residuos industriales.

Por otro lado, la fluorescencia de rayos X (XRF) es una técnica eficaz para detectar y cuantificar metales pesados como mercurio (Hg), arsénico (As) y plomo (Pb) en agua. Las configuraciones portátiles de XRF han revolucionado las mediciones en campo, permitiendo un análisis rápido y fiable sin la necesidad de transporte de muestras a laboratorios.

#### **3.3.3 Estudio de suelos y sedimentos**

La caracterización de suelos y sedimentos es otra área donde la espectroscopía MIR y de rayos X tiene un impacto significativo. En suelos, la espectroscopía infrarroja se utiliza para analizar compuestos orgánicos y estructuras minerales, proporcionando información clave sobre la fertilidad y la capacidad de secuestro de carbono.

La espectroscopía de dispersión de rayos X (XRD) se emplea para estudiar la mineralogía de los sedimentos, identificando fases cristalinas asociadas con procesos de erosión, sedimentación y contaminación. Además, técnicas como la espectroscopía de absorción de rayos X (XAS) permiten evaluar la especiación de metales pesados en suelos contaminados, lo que es fundamental para diseñar estrategias de remediación.

### 3.3.4 Impacto en ecosistemas y biogeoquímica

En ecosistemas acuáticos y terrestres, estas técnicas espectroscópicas ayudan a evaluar las interacciones entre compuestos orgánicos e inorgánicos, lo que es esencial para entender ciclos biogeoquímicos como el carbono, nitrógeno y fósforo. Por ejemplo, el uso de espectroscopía infrarroja ha permitido estudiar las dinámicas de la materia orgánica disuelta (MOD) en ríos y océanos, revelando su papel en la química del carbono global.

La espectroscopía de rayos X también es útil para analizar la bioacumulación de elementos traza en organismos vivos. Estudios recientes han utilizado técnicas de imagenología por fluorescencia de rayos X (XRF mapping) para mapear la distribución de elementos tóxicos en tejidos biológicos, como peces expuestos a ambientes contaminados.

### 3.3.5 Perspectivas futuras

El futuro de la espectroscopía en ciencias ambientales está estrechamente vinculado al desarrollo de tecnologías más accesibles, rápidas y precisas. Los avances en fuentes compactas de radiación, como láseres de fibra y dispositivos portátiles de rayos X, permitirán un monitoreo ambiental más frecuente y distribuido.

Además, la combinación de técnicas espectroscópicas con inteligencia artificial (IA) y big data mejorará la interpretación de grandes volúmenes de datos ambientales, facilitando predicciones más precisas sobre los impactos del cambio climático y la contaminación. La integración de espectroscopía ultrarrápida permitirá, en un futuro cercano, el estudio de procesos dinámicos, como reacciones químicas en atmósferas contaminadas y la interacción entre contaminantes y biomoléculas.

Finalmente, el papel de la espectroscopía en el desarrollo de materiales sostenibles, como catalizadores para la remediación ambiental y sistemas de energía limpia, destaca su importancia no solo como herramienta analítica, sino también como motor de innovación para un planeta más sostenible.

## 4 Conclusiones

La espectroscopía que abarca el rango desde el infrarrojo medio hasta los rayos X continúa demostrando su versatilidad y potencial en una amplia variedad de disciplinas científicas. Como se ha discutido en esta escuela de verano, estas técnicas han transformado áreas como las ciencias de materiales, las ciencias biomédicas y ambientales, proporcionando herramientas analíticas de alta precisión y resoluciones sin precedentes que permiten abordar problemas complejos con una profundidad técnica única.

En las ciencias de materiales, estas técnicas no solo han avanzado en la caracterización de estructuras y procesos fundamentales, sino que también están impulsando el desarrollo de nuevos materiales funcionales para aplicaciones tecnológicas y energéticas. Por su parte, en biomedicina y biología, estas herramientas están permitiendo diagnósticos más precisos, exploraciones moleculares detalladas y la generación de conocimiento clave para

el diseño de terapias avanzadas y el entendimiento de procesos biológicos esenciales. En ciencias ambientales, el impacto de estas técnicas es crucial para abordar problemas globales como la contaminación, el cambio climático y la sostenibilidad de los recursos naturales.

El futuro de estas áreas es prometedor. El desarrollo de fuentes avanzadas de radiación, la miniaturización de equipos y la integración con inteligencia artificial están ampliando las posibilidades de estas técnicas, no solo en la investigación básica, sino también en aplicaciones prácticas que impactarán positivamente la calidad de vida y la salud del planeta. Estas oportunidades abren un abanico de posibilidades para la próxima generación de científicas y científicos interesados en explorar estas fronteras del conocimiento.

Invitamos a las y los estudiantes que han participado en esta escuela de verano a considerar realizar proyectos de investigación en alguna de estas áreas apasionantes. El Dr. Antonio M. Juárez, responsable del Laboratorio de Fotodinámica Molecular del Instituto de Ciencias Físicas en Cuernavaca, pone a disposición su experiencia, infraestructura y orientación para quienes deseen involucrarse en estas líneas de trabajo. Pueden contactarlo en el correo [amjuarez@icf.unam.mx](mailto:amjuarez@icf.unam.mx) para discutir ideas y posibles colaboraciones. La espectroscopía en el infrarrojo medio y los rayos X ofrece un campo vibrante y lleno de oportunidades, y estamos entusiasmados por el impacto que sus futuras contribuciones tendrán en la ciencia y la sociedad.

## 5 Referencias

- Griffiths, P.R., & de Haseth, J.A. (2007). *Fourier Transform Infrared Spectroscopy*. Wiley.
- Haase, J., & Fink, J. (2011). X-ray Absorption Spectroscopy in Materials Science. *Reports on Progress in Physics*, 74(3), 034501.
- Krause, M.O. (1979). Properties of X-ray Fluorescence Yields. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 8(2), 307–327.
- Attwood, D.T. (1999). *Soft X-Rays and Extreme Ultraviolet Radiation: Principles and Applications*. Cambridge University Press.
- Williams, K.E., & Fenwick, J. (2002). Applications of FTIR Spectroscopy to Biomedical Research. *Biomedical Research Journal*, 25, 295–310.

# Soluciones a la ecuación no lineal de Schrödinger ¿Qué hacemos con ellas si ya no tenemos superposición de estados?

Ricardo Méndez-Fragoso<sup>1</sup>, y Juan Pablo Cordero Santiago<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad 3000, Circuito Exterior S/N Alcaldía Coyoacán, C.P. 04510 Ciudad Universitaria, Ciudad de México, México

## 1. Introducción

En esta contribución para la XXXI Escuela de Verano en Física se habla sobre sistemas no lineales que se pueden encontrar en mecánica cuántica. En particular se habla de la Ecuación No Lineal de Schrödinger (ENLS), también conocida como la ecuación de Gross-Pitaevskii [1], enmarcada dentro de los sistemas cuánticos confinados. Éstos se caracterizan por ser sistemas atómicos con restricciones geométricas que cambian sus propiedades. En la comunidad, es de particular interés los sistemas a muy bajas temperaturas como los Condensados de Bose-Einstein (BEC por sus siglas en inglés), ya que éstos exhiben propiedades que pueden ser de utilidad para el desarrollo de futuras tecnologías cuánticas [2]. Para ello es necesario conocer las características que éstos presentan cuando se les quiere manipular.

En este trabajo, el lector encontrará una breve descripción de como es que se llegan a tener sistemas cuánticos no lineales en el estudio de materia ultrafría. Posteriormente se buscarán soluciones, en este caso analíticas, que permitan entender el comportamiento de la ENLS. Finalmente, se presentan un par de aplicaciones sobre como utilizar las propiedades de las soluciones encontradas, y se hará énfasis en los cálculos detallados con la finalidad de acercar este conocimiento a los estudiantes. Si al lector le interesan más detalles o aplicaciones de lo que aquí se presenta, le recomendamos consultar las referencias [3–5].

### 1.1. Contexto de la ENLS

En esta sección veremos brevemente de donde surge la ENLS como resultado de una teoría de campo medio. Para ello podemos partir de un Hamiltoniano con  $N$  partículas sujetas a un potencial que lo mantiene confinado,  $V_{ext}$ ,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi = \left( \sum_i^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{ext}(\vec{r}) \right) \Psi , \quad (1)$$

donde  $\Psi$  es la función de onda que depende de las coordenadas de cada una de las partículas en la posición  $\vec{r}_i$ . Si tomamos en cuenta las interacciones entre las partículas, una forma sencilla de incorporarlas es considerar que éstas interactúan por pares. Esto se puede atribuir a que las partículas colisionan entre ellas, y a primer orden, las más probables son las que suceden por pares. De esta manera el Hamiltoniano se puede escribir como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi = \left( \sum_i^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{ext}(\vec{r}) \right) \Psi + \sum_{i < j} \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \Psi . \quad (2)$$

donde el segundo término de la ecuación anterior es proporcional a la longitud de dispersión para colisiones elásticas por pares,  $4\pi a_s$ , y la función delta de Dirac representa las colisiones elásticas.

Si se considera que se tienen bosones por debajo de la temperatura crítica, entonces lo que se obtiene es un BEC con interacciones. Debido a que se trata de un sistema de muchas partículas en el mismo estado cuántico, la forma más sencilla de considerar las interacciones es tomar en cuenta que cada una de las partículas ve al resto del sistema como un campo medio. Esto quiere decir que si nos ubicamos en una de las partículas, y dado que todas están en el mismo estado cuántico por tratarse de un BEC, ésta verá una interacción promedio proporcional a la densidad de probabilidad,  $|\Psi|^2$ , de las  $N - 1$  partículas. De esta manera, la Ec. (2) se convierte en la ecuación de una sola partícula sujeta a un potencial externo y a una interacción efectiva:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) + g|\Psi|^2 \right) \Psi , \quad (3)$$

donde  $g$  es la intensidad de la parte no lineal que proviene de la aproximación de campo medio y que también es proporcional a las  $N - 1$  partículas,  $g = (N - 1) \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$ . La Ec. (3) es conocida como la ecuación de Gross-Pitaevskii o ENLS [1]. Note que la ecuación es muy similar a su contraparte lineal, pero con la excepción de que el último término en la ecuación aporta la no linealidad y es proporcional al cubo de la función de onda. Uno de los primeros pasos para encontrar soluciones a dicha ecuación es tener los estados estacionarios. Para ello podemos proponer como solución la función de onda  $\Psi = e^{-i\mu t/\hbar} \phi(\vec{r})$ , y obtenemos la ecuación

$$\mu\phi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) + g|\phi|^2 \right) \phi , \quad (4)$$

donde  $\mu$  es el potencial químico, y la función  $\phi$  es una función que solo depende de la posición<sup>1</sup>. El caso que nos ocupará en esta contribución es cuando se tiene un BEC en una guía de ondas. Experimentalmente, la forma de obtener esta configuración es cuando se tiene un BEC cerca de un chip atómico sobre el cual se tiene una pista, alambre conductor, con corriente. Ésta genera un campo magnético que comprime al BEC en la dirección transversal a la corriente, mientras lo alarga en la otra dirección. Básicamente, lo que se está haciendo es utilizar un sistema no lineal que queda confinado mayormente en una dirección [6–11]. De esta manera, la Ec. (4) se convierte en una ecuación en una dimensión, y si además consideramos unidades atómicas, dicha ecuación toma la siguiente forma

$$\mu\phi = \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{ext}(\vec{r}) + g|\phi|^2 \right) \phi , \quad (5)$$

donde el potencial efectivo que produce el confinamiento se puede expresar de la siguiente manera

$$V_{ext} = \begin{cases} -V_0 & \text{para } |x| \leq R \\ 0 & \text{para } |x| > R \end{cases} \quad (6)$$

donde  $R$  es el alcance efectivo del potencial con profundidad  $V_0 > 0$ .

---

<sup>1</sup>Utilizamos el potencial químico  $\mu$  debido a que el contexto de este tipo de sistemas utilizan la energía por partícula que se encuentra en el BEC.

## 2. La Ecuación no Lineal de Schrödinger y sus soluciones analíticas

En esta sección veremos la forma de encontrar soluciones analíticas a la ENLS, pero primero veremos un repaso de como se pueden encontrar las soluciones para su contraparte lineal. La metodología utilizada no es la estándar a la que se encuentra en la mayoría de los libros de mecánica cuántica o de ecuaciones diferenciales. El objetivo es ilustrar el camino para encontrar soluciones analíticas para algo bien conocido, y de ahí hacer una extensión para encontrar soluciones a sistemas o ecuaciones no lineales.

### 2.1. Solución a la ELS en una dimensión para un pozo cuadrado

La solución a la Ec. (5) se puede encontrar por integración directa utilizando el método de cuadraturas. Sin embargo, antes de encontrar una solución a dicha ecuación, primero veamos como hacerlo en el caso lineal. Para ello podemos partir de la ecuación lineal de Schrödinger (ELS) en una dimensión e independiente del tiempo

$$E\phi = \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{ext}(\vec{r}) \right) \phi , \quad (7)$$

con el mismo potencial que en la Ec. (6). Veamos el caso en el que  $|x| \leq R$ , donde las soluciones con energías  $-V_0 \leq E \leq 0$ . La ecuación anterior se puede escribir de la siguiente manera

$$\frac{1}{2}\phi'' + (E + V_0)\phi = 0 , \quad (8)$$

donde el término  $E + V_0$  es positivo. Si multiplicamos la ecuación por  $\phi'$

$$\frac{1}{2}\phi''\phi' + (E + V_0)\phi\phi' = 0 , \quad (9)$$

podemos integrar directamente la ecuación para obtener la siguiente forma

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{1}{4}\phi'^2 + \frac{1}{2}(E + V_0)\phi^2 \right) = 0 \implies \phi'^2 + 2(E + V_0)\phi^2 = C , \quad (10)$$

donde  $C$  es una constante que depende de las condiciones a la frontera de dicha ecuación. De esta ecuación podemos despejar  $\phi'$  para obtener

$$\phi' = \sqrt{C - 2(E + V_0)\phi^2} \implies \int \frac{d\phi}{\sqrt{C - 2(E + V_0)\phi^2}} = \int dx . \quad (11)$$

Esta integral se puede hacer directamente dependiendo del valor de  $C$ . Note que el valor  $C \geq 2(E + V_0) \geq 0$  debido a la forma de la Ec. (10). Esta ecuación tiene como solución para el lado izquierdo la función  $\sin^{-1}(\cdot)$ . De esta manera la solución se puede escribir como

$$\frac{1}{\sqrt{2(E + V_0)}} \sin^{-1} \left( \sqrt{\frac{2(E + V_0)}{C}} \phi \right) = x - x_0 , \quad (12)$$

donde  $x_0$  es una constante que dependerá de las condiciones de frontera antes mencionadas. Finalmente, con la relación anterior podemos escribir la solución a la Ec. (7) de la siguiente manera

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{C}{2(E + V_0)}} \sin \left( \sqrt{2(E + V_0)}(x - x_0) \right) . \quad (13)$$

Como era de esperarse, la solución queda en términos de funciones trigonométricas, donde las constantes  $C$  y  $x_0$  se determinarán en términos de las condiciones a la frontera.

En el caso de las soluciones para fuera del potencial,  $|x| > R$ , se tiene que las soluciones equivalentes a la Ec. (12) son del tipo logarítmico para el lado izquierdo. En consecuencia, las soluciones equivalentes a la Ec. (13) son exponenciales decrecientes. Lo que sigue a continuación en el proceso de encontrar soluciones a la ELS en una dimensión es estándar de cualquier libro de mecánica cuántica básica [12]. En lo que respecta a esta contribución, basta con ilustrar un método alternativo para encontrar una solución a la ELS, mismo que se utilizará en las secciones subsecuentes para encontrar la solución a la ENLS.

Hasta el momento no se ha encontrado algo diferente a lo que se ve en cualquier curso de mecánica cuántica básica. El siguiente paso sería tomar en cuenta la parte no lineal, pero lo cual la técnica anterior para encontrar una solución analítica será de mucha utilidad. Sin embargo, antes de continuar vale la pena realizar un recordatorio sobre las soluciones analíticas que se encuentran para el péndulo simple. Estas soluciones son cruciales para poder encontrar el paso equivalente al que se muestra en la Ec. (11).

## 2.2. Soluciones completas al péndulo simple

El movimiento del péndulo es uno de los sistemas más utilizados en la antigüedad para medir tiempos. Típicamente su movimiento es descrito para ángulos pequeños, ya que en estos casos se obtienen soluciones armónicas en términos de funciones trigonométricas que son más fáciles de entender y manipular. Sin embargo, en esta contribución encontraremos la solución para cualquier ángulo como condición inicial y partiendo del reposo, ya que de esta manera podremos utilizar dichas soluciones para encontrar las soluciones a la ENLS.

Comencemos con escribir la energía de un péndulo con longitud  $\ell$  y masa  $m$  como se muestra en la Figura 1.

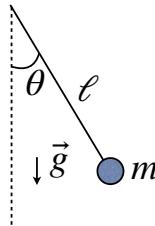


Figura 1: Péndulo de masa  $m$  y longitud  $\ell$ . El ángulo que se hace con la vertical es  $\theta$ .

En este caso no se va a considerar fricción, y sin pérdida de generalidad podemos tomar la energía del péndulo como el punto inicial de su movimiento determinado por el ángulo inicial  $\theta_0$ . Recuerde que en este punto la velocidad del péndulo es nula,  $\dot{\theta}_0 = 0$ . De esta manera podemos escribir

$$E = \frac{1}{2}m\ell^2\dot{\theta}^2 + mg\ell(1 - \cos\theta) = mg\ell(1 - \cos\theta_0). \quad (14)$$

Veamos como encontrar el periodo,  $\tau$ , de dicho péndulo. Para ello procedamos como en el caso de la sección anterior. Despejando el término  $\dot{\theta}$  podemos escribir la cuadratura correspondiente

$$\frac{d\theta}{dt} = \sqrt{\frac{2g}{\ell}} \sqrt{\cos\theta - \cos\theta_0} \implies \tau = 4 \sqrt{\frac{\ell}{2g}} \int_0^{\theta_0} \frac{d\theta}{\sqrt{\cos\theta - \cos\theta_0}}, \quad (15)$$

donde el número 4 proviene de considerar que estamos haciendo la integral sobre un cuarto del periodo debido a que la integral tiene los límites de 0 a  $\theta_0$ . Una manera de resolver dicha integral es utilizar la identidad  $\cos x = 1 - \sin^2 \frac{x}{2}$ , tanto para  $\theta$  como para  $\theta_0$ , y con ello obtener

$$\tau = 4 \sqrt{\frac{\ell}{4g}} \int_0^{\theta_0} \frac{d\theta}{\sqrt{\sin^2 \frac{\theta_0}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2}}} . \quad (16)$$

Hay un cambio de variable que resulta muy conveniente, el cual es el siguiente

$$\sin \varphi = \frac{\sin \frac{\theta}{2}}{\sin \frac{\theta_0}{2}} \implies \cos \varphi d\varphi = \frac{\cos \frac{\theta}{2}}{2 \sin \frac{\theta_0}{2}} d\theta . \quad (17)$$

Note que este cambio de variable implica que el límite inferior sigue siendo 0, y que el límite superior siempre es  $\pi/2$ . Al sustituir el cambio de variable con sus respectivos límites de integración obtenemos

$$\tau = 4 \sqrt{\frac{\ell}{4g}} \int_0^{\pi/2} \frac{2d\varphi}{\cos \frac{\theta}{2}} = 4 \sqrt{\frac{\ell}{4g}} \int_0^{\pi/2} \frac{2d\varphi}{\sqrt{1 - \sin^2 \frac{\theta}{2}}} = 4 \sqrt{\frac{\ell}{g}} \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - \sin^2 \frac{\theta_0}{2} \sin^2 \varphi}} . \quad (18)$$

Finalmente definimos el término  $m = \sin^2 \frac{\theta_0}{2}$  para escribir

$$\tau(m) = 4 \sqrt{\frac{\ell}{g}} \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - m \sin^2 \varphi}} . \quad (19)$$

Note que el parámetro  $m \in [0, 1]$ , y que la integral tiene límites fijos. Esto representa una ventaja enorme en el cálculo del periodo del péndulo, ya que la amplitud dada por  $\theta_0$  se encuentra representada por el parámetro  $m$  dentro de ésta. Observe que para ángulos pequeños,  $|\theta_0| \ll 1$ , el término  $m$  es todavía mucho más pequeño debido a que es proporcional al cuadrado del seno. Esto hace que la integral para ángulos pequeños sea simplemente  $\int_0^{\pi/2} d\varphi = \pi/2$ , y con ello se recupera la expresión usual para el periodo del oscilador armónico,  $\tau_0 = 2\pi\sqrt{\ell/g}$ . De hecho, la Ec. (19) proporciona una manera de calcular desviaciones en el periodo, ya que podemos expandir dicha ecuación en series de potencias de  $m$  para ángulos que no sean tan pequeños, ya que dentro de este parámetro se encuentra el valor de  $\theta_0$ . En dicho caso, y al tratarse de polinomios no es difícil calcular los términos de la serie. En esta contribución nos interesa el resultado en la Ec. (19), y en general el valor de  $\theta$  como función del tiempo,  $\theta(t)$ , se puede encontrar con la inversa de la siguiente relación

$$t = 4 \sqrt{\frac{\ell}{g}} \int_0^\theta \frac{du}{\sqrt{1 - m \sin^2 u}} . \quad (20)$$

Cabe mencionar que la función encontrada en la ecuación anterior es conocida como la integral elíptica incompleta de Jacobi de primer orden

$$\chi(\theta|m) = \int_0^\theta \frac{du}{\sqrt{1 - m \sin^2 u}} . \quad (21)$$

De hecho, con la inversa de dicha relación es posible encontrar el valor de  $\theta$  como función de  $\chi$ , y a esta función se le conoce como la amplitud de Jacobi,  $\theta = \text{am}(\chi|m)$ . Note que el parámetro  $m$

es común para ambas funciones. Con ello podemos definir las funciones seno y coseno elíptico de Jacobi de la siguiente manera

$$\text{sn}(\chi|m) = \sin(\text{am}(\chi|m)) , \quad (22)$$

$$\text{cn}(\chi|m) = \cos(\text{am}(\chi|m)) . \quad (23)$$

Note que estas funciones obedecen propiedades similares a las trigonométricas. De hecho, se puede definir una tercera función independiente de la siguiente manera

$$\text{dn}(\chi|m) = \sqrt{1 - \text{sn}^2(\chi|m)} . \quad (24)$$

Cabe mencionar que las funciones elípticas de Jacobi son de hecho una generalización de las funciones trigonométricas e hiperbólicas, ya que éstas se pueden definir o recuperar de la siguiente manera<sup>2</sup>

$$\text{sn}(\chi|0) = \sin(\chi) \quad \text{y} \quad \text{sn}(\chi|1) = \tanh(\chi) , \quad (25)$$

$$\text{cn}(\chi|0) = \cos(\chi) \quad \text{y} \quad \text{sn}(\chi|1) = \text{sech}(\chi) . \quad (26)$$

Con estas nuevas funciones podemos encontrar soluciones analíticas a la ENLS para un pozo de potencial como se vio en la sección 2.1. En la Figura 2 se puede encontrar el comportamiento de las funciones elípticas de Jacobi para varios valores de  $m$ .

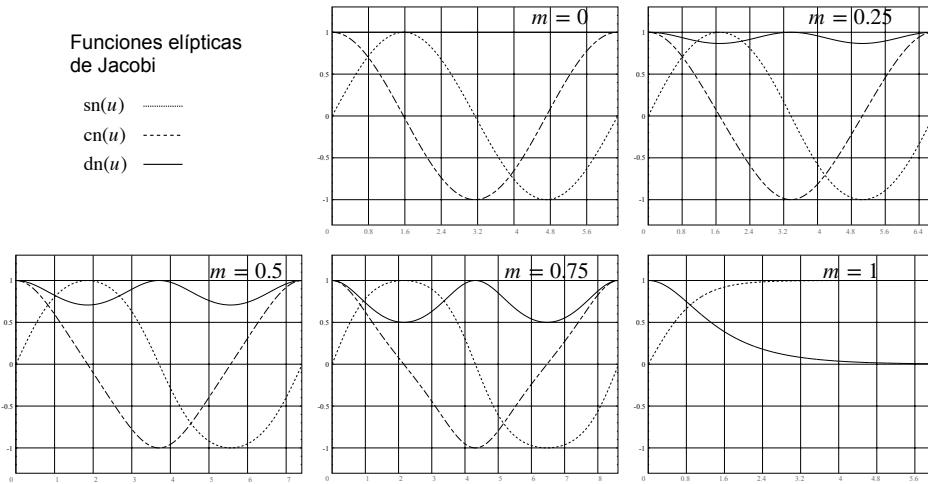


Figura 2: Funciones elípticas de Jacobi sn, cn y dn para diferentes valores del parámetro  $m$ .

### 2.3. Solución a la ENLS en una dimensión para un pozo cuadrado

Vamos a partir de la Ec. (5) sujeta al potencial en la Ec. (6). Para el caso con  $|x| \leq R$  podemos proceder de la misma manera que en la sección 2.1, y por esta razón multipliquemos la Ec. (2.3) por  $\phi'$  obteniendo

$$\frac{d}{dx} \left( -\frac{1}{4} \phi'^2 - \frac{1}{2}(V_0 + \mu)\phi^2 + \frac{g}{4}\phi^4 \right) = 0 \implies -\frac{1}{4}\phi'^2 - \frac{1}{2}(V_0 + \mu)\phi^2 + \frac{g}{4}\phi^4 = C . \quad (27)$$

donde  $C$  es una constante que depende de las condiciones a la frontera. Por ejemplo, la condición a la frontera del estado base para un pozo simétrico tiene la característica de que  $\phi'(0) = 0$  y

---

<sup>2</sup>Si el lector está interesado en conocer mas de las funciones elípticas de Jacobi puede encontrar más información en la referencia [13].

$\phi(0) = \phi_0$ . Si en la Ec. (27) hacemos el cambio de variable

$$\xi = \sqrt{\frac{(1+m)g}{2m(V_0+\mu)}}\phi \quad y \quad \chi = \sqrt{\frac{2(V_0+\mu)}{1+m}}x , \quad (28)$$

encontramos que la ecuación para la cuadratura se escribe como

$$-\left(\frac{d\xi}{d\chi}\right)^2 - (1+m)\xi^2 + m\xi^4 = -(1+m)\xi_0^2 + m\xi_0^4 . \quad (29)$$

Si despejemos  $\frac{d\xi}{d\chi}$ , y además sumamos y restamos la unidad, procedemos factorizar la expresión de la siguiente manera

$$\left(\frac{d\xi}{d\chi}\right)^2 = (1-\xi^2)(1-m\xi^2) - (1-\xi_0^2)(1-m\xi_0^2) . \quad (30)$$

Sin pérdida de generalidad podemos escoger  $\xi_0 = 1$ , ya que posteriormente se utilizará la normalización para realizar otros cálculos. De esta manera, la cuadratura queda de la siguiente manera

$$\int d\chi = \int \frac{d\xi}{\sqrt{(1-\xi^2)(1-m\xi^2)}} , \quad (31)$$

donde finalmente podemos hacer el cambio de variable  $\xi = \sin u$  para obtener

$$\chi = \int \frac{du}{\sqrt{(1-m\sin^2 u)}} , \quad (32)$$

que es precisamente la integral elíptica incompleta de Jacobi, misma que encontramos en la Ec. (21) de la sección anterior. La solución para el interior del pozo de potencial en términos de las variables originales es

$$\phi_{in}(x) = \sqrt{\frac{2m(V_0+\mu)}{(1+m)g}} \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{2(V_0+\mu)}{1+m}}x + K(m) \right) , \quad (33)$$

donde  $K(m)$  es una fase que dependerá de la paridad de la función<sup>3</sup>. Con el desarrollo anterior hemos encontrado que la solución para  $|x| \leq R$ . Para la parte en el que  $|x| > R$  se puede proceder de la misma manera, y no es difícil ver que las soluciones son

$$\phi_{out}(x) = \sqrt{\frac{2|\mu|}{g}} \operatorname{csch}(\sqrt{2|\mu|}x + a) \quad \text{para } |\mu| \neq 0 , \quad (34)$$

$$\phi_{out}(x) = \frac{1}{a + \sqrt{g}x} \quad \text{para } |\mu| = 0 \quad (35)$$

donde hemos puesto explícitamente  $|\mu|$  para indicar que estamos interesados en funciones con energía o potencial químico negativo, y el valor de  $a$  es un parámetro que deberá ajustarse dependiendo de la condición a la frontera con el pozo de potencial.

### 3. Aplicaciones de las soluciones a la ENLS

En esta sección veremos como utilizar las soluciones encontradas para calcular propiedades de los BEC's descritos por la ENLS. En particular nos basaremos en los desarrollos que se encuentran en las referencias [3–5].

---

<sup>3</sup>Debido a que se trata de una ecuación diferencial de segundo orden, se tienen dos soluciones, una par y otra impar. Las soluciones pares vienen con el término  $K(m)$  y las impares sin éste.

### 3.1. Conteo de partículas en un BEC

Una de las primeras aplicaciones que se pueden hacer de las soluciones de la ENLS que hemos encontrado es para contar partículas en el pozo de potencial. Recuerde que el valor de  $g$ , la parte no lineal de la ENLS, está relacionada con el número de partículas en el BEC como se vio en la sección 1.1. Si tenemos una solución analítica de la ENLS, podemos utilizar esta información para inferir cuantas partículas es capaz de atrapar el pozo de potencial.

Para ello utilicemos la solución completa de la ENLS que se vio en la sección 2.3. En particular nos interesa cuando  $\mu = 0$ , ya que de esta manera es posible encontrar cual es el número máximo de partículas que se pueden atrapar en dicho potencial. De esta manera, la solución encontrada para el estado base se escribe como

$$\phi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2mV_0}{(1+m)g}} \operatorname{sn}\left(\sqrt{\frac{2V_0}{1+m}}x + K(m)\right) & \text{para } |x| \leq R \\ \frac{1}{a + \sqrt{g}|x|} & \text{para } |x| > R \end{cases} \quad (36)$$

Note que se ha utilizado la solución par debido a que el estado base es simétrica respecto al eje vertical. Posteriormente, aplicamos las condiciones a la frontera dadas por

$$\phi(R^-) = \phi(R^+) \quad \text{y} \quad \phi'(R^-) = \phi'(R^+), \quad (37)$$

donde los signos  $-$  y  $+$  significan que nos acercamos a  $R$  por la izquierda y la derecha respectivamente. Si aplicamos estas condiciones a la función en la Ec. (36) obtenemos después de varios cálculos que se debe cumplir la siguiente condición

$$\operatorname{sn}\left(\sqrt{\frac{2V_0}{1+m}}R\right) = \sqrt{m}. \quad (38)$$

Note que esta condición depende del parámetro  $m$ , y para valores dados el pozo de potencial  $\sqrt{V_0}R$  se tendrá que encontrar un valor para dicho parámetro. En el caso particular del estado base, el valor de  $m$  no produce nodos en la función de onda. Finalmente, podemos utilizar la normalización de la función de onda,  $\int_{-\infty}^{\infty} \phi^2 dx$ , para encontrar el valor de  $g$ . De hecho este valor lo denotamos como  $g_{max}$  debido que nos proporciona el valor máximo de este parámetro, y al mismo tiempo el número de partículas que el pozo de potencial puede atrapar

$$\frac{g_{max}}{2\sqrt{V_0}} = \alpha^2 \sqrt{V_0}R - \alpha E\left(\alpha \sqrt{V_0}R|m\right) + \sqrt{2m}, \quad (39)$$

donde se ha nombrado el parámetro  $\alpha^2 = \frac{2}{1+m}$  para simplificar la expresión, y la función  $E(\cdot|m)$  es la integral elíptica de segunda especie. El comportamiento de la función anterior como función del tamaño efectivo del potencial,  $\sqrt{V_0}R$ , se puede ver la Figura 3.

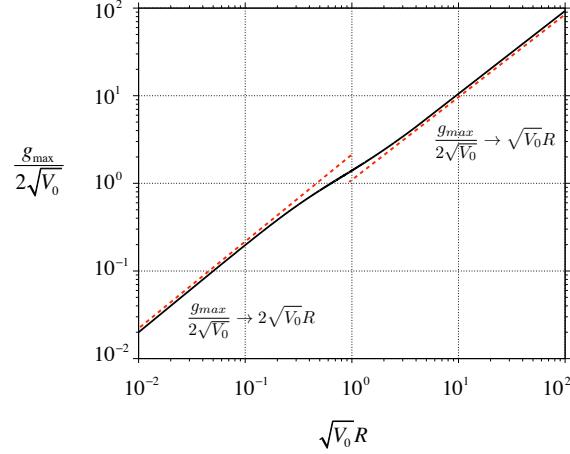


Figura 3: Estado base de la ENLS. En rojo se ilustran las tendencias cuando  $\sqrt{V_0}R \rightarrow 0$  y  $\sqrt{V_0}R \rightarrow \infty$ .

Note que la gráfica en la Figura 3 tiene ambos ejes con escala logarítmica con la finalidad de ilustrar la tendencia cuando  $\sqrt{V_0}R \rightarrow 0$  y  $\sqrt{V_0}R \rightarrow \infty$ . El comportamiento cuando  $\sqrt{V_0}R \rightarrow 0$  muestra que conforme el pozo de potencial se hace cada vez más pequeño, el valor de  $g$  también lo hace. Este resultado contrasta con el valor finito que se reporta en la referencia [14], ya que en ésta se realizan aproximaciones para encontrar el valor de  $g$  cuando se tienen pozos de potencial pequeños. De aquí la importancia de tener soluciones analíticas para poder realizar cálculos precisos como en la Ec. (39), y que se ven reflejados en la Figura 3. Además, este resultado concuerda con la intuición de que conforme el potencial se hace más pequeño, el valor de  $g$  debe disminuir y no quedar como un valor finito, ya que en este límite, uno esperaría que la ENLS se pareciese más a su contraparte lineal. Por otra parte, el comportamiento de la solución cuando  $\sqrt{V_0}R \rightarrow \infty$  es el llamado límite de Thomas-Fermi donde el acoplamiento no lineal hace que la función de onda mimetice la forma del potencial.

### 3.2. Coexistencia de estados

El siguiente punto a estudiar con este tipo de soluciones, es la coexistencia de dos o más estados en la ENLS. Primero veamos si es posible encontrar un estado base en coexistencia con el primer estado excitado.

La condición encontrada en la Ec. (38) es válida para el estado base con  $\mu = 0$ . Sin embargo, para los estados impares esta condición no aplica. Para encontrarla es necesario utilizar la solución encontrada en la sección 2.3 pero para estados impares, la cual es la siguiente

$$\phi(x) = \begin{cases} \frac{1}{a + \sqrt{gx}} & \text{para } x < -R \\ \sqrt{\frac{2mV_0}{(1+m)g}} \operatorname{sn}\left(\sqrt{\frac{2V_0}{1+m}}x\right) & \text{para } |x| \leq R \\ \frac{1}{-a + \sqrt{gx}} & \text{para } x > R \end{cases} \quad (40)$$

Note que en este caso la función es impar respecto al origen y ahora esta función es la que se encuentra con  $\mu = 0$ , mientras que la función del estado base, función par, se encuentra con  $\mu < 0$ . Al igual que en el caso anterior se aplican las condiciones a la frontera en la Ec. (37), y después de realizar algunos cálculos se encuentra que

$$\operatorname{sn}\left(\sqrt{\frac{2V_0}{1+m}}R\right) = \sqrt{\frac{1}{1+m}}. \quad (41)$$

Note que esta condición implica necesariamente que  $\sqrt{V_0}R \geq \pi/2$ , ya que para valores menores no se puede encontrar un valor de  $m$  que satisfaga dicha ecuación. Esto era algo predecible, ya que al ser el primer estado excitado, no siempre se tiene garantía de su existencia y por lo tanto debe haber un tamaño de pozo de potencial mínimo para el cual éste pueda existir<sup>4</sup>. Si se hace el cálculo de la normalización del estado excitado es posible encontrar que el valor de  $g_{max}^1$ , mismo que se escribe de la siguiente manera

$$\frac{g_{max}^1}{2\sqrt{V_0}} = \alpha_e^2 \sqrt{V_0}R - \alpha_e E \left( \alpha_e \sqrt{V_0}R | m_e \right) + \frac{\sqrt{2m_e}}{1+m_e}, \quad (42)$$

Note que hemos utilizado el superíndice 1 en  $g_{max}$  y el subíndice  $e$  en  $m$  y  $\alpha$  para denotar que este cálculo únicamente corresponde a este estado<sup>5</sup>. En la Figura 4 se muestran con signos + los valores de  $g$  para el estado base y el primer estado excitado. Se puede observar que a partir de  $\sqrt{V_0}R = \frac{\pi}{2\sqrt{2}}$  se comienza a ver el primer estado excitado. Si el lector está interesado en conocer mas sobre los otros potenciales, puede consultar la referencia [3].

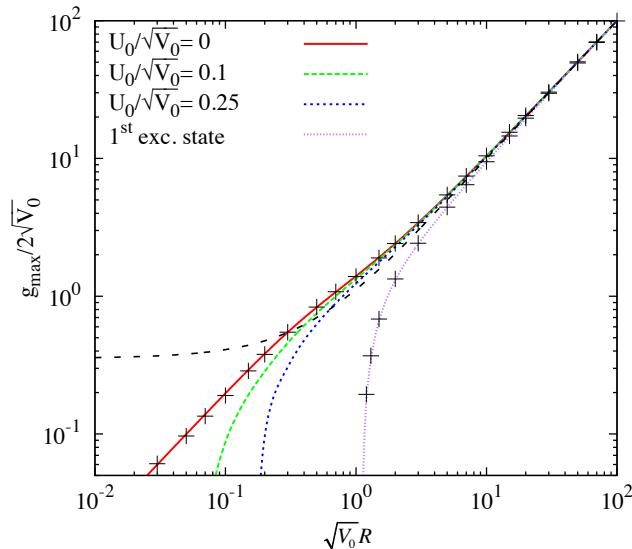


Figura 4: En la gráfica se muestran varios comportamientos de  $g$  dependiendo de los potenciales que se utilicen. En particular se muestran con signos + los que corresponden al estado base y al primer estado excitado.

Hasta aquí se ha podido encontrar que la ENLS puede proporcionar varios estados de manera aislada. Sin embargo, lo primero que uno se puede preguntar es si es posible tener estados en coexistencia. Esto es posible si se toman en cuenta las condiciones que se deben cumplir. En primer lugar se debe considerar que de existir ambos estados, éstos tienen que tener el mismo valor de  $g$  bajo el mismo potencial. Una manera de encontrar estas condiciones es tener al primer estado excitado en el umbral de deslocalización,  $\mu = 0$ , y posteriormente buscar si es posible tener un estado base con el mismo valor de  $g$  y mismo pozo de potencial. Esto es posible si primero se busca el valor de  $m$  y  $g$  del primer estado excitado con las Ecs. (41) y (42). Posteriormente se tiene que buscar el estado base compatible con el valor de  $g$  encontrado. Para ello se utilizan las ecuaciones para estados pares para  $\mu < 0$ , mismas que son una pequeña variación de las encontradas en las Ecs. (38) y (39). No es difícil obtener estas ecuaciones utilizando la solución para  $\mu < 0$ , y lo que se

<sup>4</sup>El caso del estado base siempre existe como se puede observar en la Ec. (38).

<sup>5</sup>En la literatura es común encontrar que se utilicen los subíndices  $g$  y  $e$  para denotar los estados base y excitado respectivamente

encuentra es que las ecuaciones que debe obedecer el estado base compatible con el primer estado excitado en el umbral de deslocalización son

$$\operatorname{sn}^2 \left( \alpha_g \xi \sqrt{1-\eta} \right) = \frac{m_g + \eta}{1 + m_g \eta}, \quad (43)$$

$$\frac{g_{\max}}{2\sqrt{V_0}} = \alpha_g^2 (1-\eta) \xi - \alpha_g \sqrt{1-\eta} E \left( \alpha \sqrt{1-\eta} \xi | m \right) - \sqrt{2\eta} + \sqrt{\frac{2(m_g + \eta)}{1 + m_g \eta}}, \quad (44)$$

donde se ha utilizado  $\eta = |\mu|/V_0$ ,  $\alpha^2 = \frac{1}{1+m}$  y  $\xi = \sqrt{V_0}R$  para simplificar las expresiones, y además el subíndice  $g$  se ha hecho explícito para indicar que se trata del valores para el estado base. Note que en la Ec. (44) se tiene que utilizar el mismo valor de  $g$  que en el primer estado excitado.

En la Figura 5 se muestran el estado base y primer estado excitado donde se aprecian sus formas típicas y su coexistencia. Se puede ver que el estado base no tiene nodos, mientras que el primer estado excitado tiene un nodo en el centro. También se puede ver en la parte de la derecha de la Figura el rango de coexistencia de estos dos estados. Como se puede apreciar, ambos estados pueden estar dentro del pozo de potencial, uno en el umbral de deslocalización y el otro por debajo dependiendo del tamaño del pozo de potencial en términos de  $\sqrt{V_0}R$ . Se puede observar que conforme el pozo se hace pequeño, poco después de la unidad, el estado excitado deja de existir y únicamente queda el estado base.

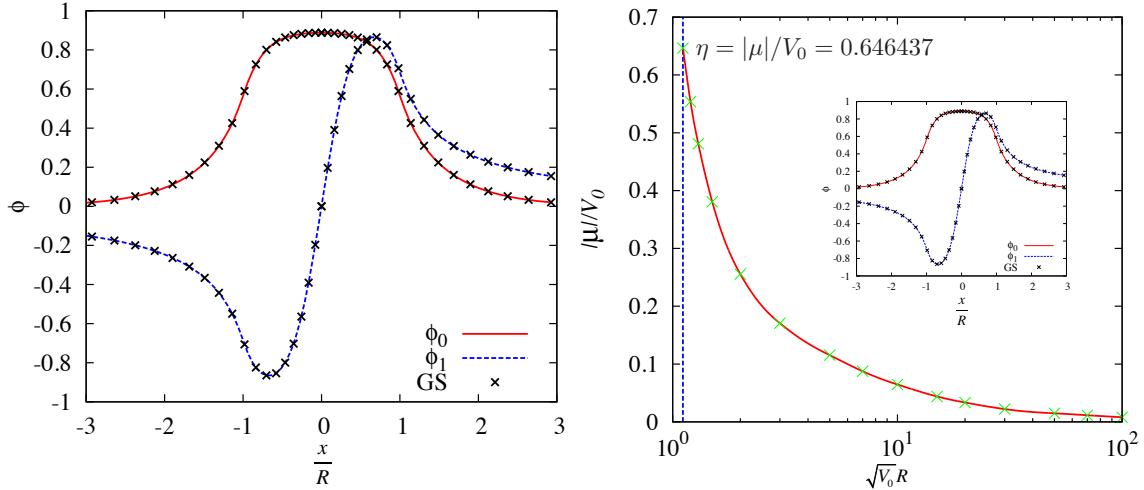


Figura 5: En la gráfica de la izquierda se muestran las formas que tiene la función de onda del estado base y primer estado excitado de la ENLS. Del lado derecho se muestra la curva de coexistencia del estado base con el primer estado excitado como función de  $\sqrt{V_0}R$ .

Cabe mencionar que, si bien es cierto que pueden existir dos estados, no es posible escribir la solución completa de la ENLS debido a que una superposición de éstos no es solución debido a la no linealidad de la ecuación. Sin embargo, se ha mostrado de manera analítica que ambos estados si pueden coexistir.

## 4. Conclusiones

En esta contribución se ha revisado la forma de obtener soluciones analíticas para la ENLS. En particular se ha utilizado una integración directa a partir del método de cuadraturas que se utiliza mucho en sistemas de mecánica clásica. Si bien es cierto que la solución encontrada es únicamente

para sistemas unidimensionales, su importancia radica en que este tipos de sistemas se pueden producir experimentalmente, principalmente en guías de onda de materia ultrafría.

Por otra parte, se revisaron un par de aplicaciones de dichas soluciones. Por un lado se revisó como es posible contar partículas dentro de un pozo de potencial utilizando el acoplamiento no lineal de la ENLS. Por otra parte, se encontró que es posible tener estados en coexistencia para la ENLS. Ésto último es un resultado muy importante para la comunidad, ya que plantea nuevos problemas en el estudio de este tipo de sistemas. En particular, una de las principales preguntas que se deben responder es como escribir la solución completa cuando se tienen estados en coexistencia. Así mismo, también es importante conocer lo que ocurre con las partículas que están en el primer estado excitado cuando éste deja de coexistir con el estado base.

Como se ha podido apreciar, el estudio de sistemas cuánticos confinados en su versión no lineal ha abierto un mundo de posibilidades que dejan preguntas abiertas sobre el comportamiento de este tipo de sistemas. Es importante recalcar que la fenomenología que presentan los sistemas expuestos en esta contribución se deben principalmente a tomar en cuenta las interacciones entre sus componentes, y ello nos acerca mucho mas al comportamiento real que éstos tienen.

## Agradecimientos

Se agradece el apoyo otorgado por los proyectos PAPIME PE109423 y PAPIIT IN105924. Esta contribución se hace en memoria del Dr. Eugenio Ley Koo, colega y amigo, quien por muchos años participó impartiendo cursos y conferencias en la Escuela de Verano en Física.

## Referencias

- [1] Franco Dalfovo, Stefano Giorgini, Lev P. Pitaevskii, & Sandro Stringari (1999). Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Reviews of Modern Physics*, 71, 463-512.
- [2] A. Griffin, D. W. Snoke, & S. Stringari (1995). *Bose-Einstein Condensation*. Cambridge University Press.
- [3] R. Méndez-Fragoso, & R. Cabrera-Trujillo (2015). Confinement effects on an ultra-cold matter wave-packet by a square well impurity near the de-localization threshold: Analytic solutions, scaling, and width properties. *European Physical Journal D*, 69.
- [4] R. Méndez-Fragoso, & R. Cabrera-Trujillo (2015). On a Hyperbolic Solution to the Nonlinear Schrödinger Equation for a Square Well Potential Coupled to a Contact Impurity at the Delocalization Threshold. (Vol. 71) Elsevier.
- [5] R. Méndez-Fragoso, & R. Cabrera-Trujillo (2021). Confinement of an ultra-cold-matter wave packet near the delocalization threshold by a waveguide bend with two or more contact impurities. *European Physical Journal D*, 75.
- [6] H. Ott, J. Fortagh, G. Schlotterbeck, A. Grossmann, & C. Zimmermann (2001). Bose-Einstein Condensation in a Surface Microtrap. *Physical Review Letters*, 87, 230401.
- [7] J. Reichel, W. Hänsel, & T. W. Hänsch (1999). Atomic Micromanipulation with Magnetic Surface Traps. *Physical Review Letters*, 83, 3398-3401.

- [8] Karolina Brugger, Tommaso Calarco, Donatella Cassetta, Ron Folman, Albrecht Haase, Björn Hessmo, Peter Krüger, Thomas Maier, & Jorg Schmiedmayer (2000). Nanofabricated atom optics: Atom chips. *Journal of Modern Optics*, 47, 2789-2809.
- [9] K Henderson, C Ryu, C MacCormick, & M G Boshier (2009). Experimental demonstration of painting arbitrary and dynamic potentials for Bose-Einstein condensates. *New Journal of Physics*, 11, 043030.
- [10] Alexander D. Cronin, Jörg Schmiedmayer, & David E. Pritchard (2009). Optics and interferometry with atoms and molecules. *Reviews of Modern Physics*, 81, 1051-1129.
- [11] A. E. Leanhardt, A. P. Chikkatur, D. Kielpinski, Y. Shin, T. L. Gustavson, W. Ketterle, & D. E. Pritchard (2002). Propagation of Bose-Einstein Condensates in a Magnetic Waveguide. *Physical Review Letters*, 89, 040401.
- [12] David J. Griffiths, & Darrell F. Schroeter (2018). *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press.
- [13] Milton Abramowitz, & Irene Stegun (1964). *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Applied Mathematics series, Dover Publications.
- [14] B. T. Seaman, L. D. Carr, & M. J. Holland (2005). Effect of a potential step or impurity on the Bose-Einstein condensate mean field. *Physical Review A*, 71, 033609.

# Photonic: Un paquete para el cálculo de propiedades ópticas de metamateriales y cristales fotónicos\*

W. Luis Mochán<sup>1</sup>, Guillermo P. Ortiz<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México,  
Av. Universidad s/n, Col. Chamilpa, 62100 Cuernavaca, Morelos, México

<sup>2</sup>Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura,  
Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, Argentina

13 de diciembre de 2024

## Resumen

*Photonic* es un paquete libre y gratuito para calcular propiedades electromagnéticas de metamateriales y cristales fotónicos, implementado en el lenguaje de computación *Perl*, usando el paquete *Perl Data Language* (PDL) para el procesamiento numérico y el sistema *Moo* para definir roles, clases y objetos. El paquete provee herramientas para calcular la permitividad macroscópica de medios compuestos arbitrarios hechos de un número arbitrario de materiales, sean conductores o aislantes, transparentes u opacos, dispersivos o no, no disipativos o absorbentes, isotrópicos o anisotrópicos. También permite geometrías y arreglos periódicos arbitrarios, y los arreglos no periódicos pueden aproximarse mediante ensambles de sistemas periódicos con celdas unitarias desordenadas grandes. El paquete también permite calcular los campos microscópicos y los tensores de susceptibilidad no lineal. Puede sacar provecho de algunas simplificaciones para casos particulares de materiales binarios y de campos con longitud de onda larga.

## 1. Introducción

Un *metamaterial* es un material artificial hecho de una mezcla de uno o más materiales ordinarios un un arreglo geométrico[23]. Las propiedades ópticas de un metamaterial pueden ser muy distintas de aquellas de sus componentes. Por ejemplo, un metamaterial hecho de anillos metálicos interrumpidos impresos en una placa aislante (fig. 1, izquierda) puede mostrar resonancias tipo LC, en las cuales los electrones de conducción circulan alrededor de los anillos produciendo un dipolo magnético grande. Así, un metamaterial hecho de componentes no magnéticas podría tener una respuesta magnética macroscópica [1]. A cierta frecuencia, la permeabilidad magnética efectiva,  $\mu$ , podría resonar, y arriba de dicha frecuencia podría adquirir un valor negativo. Por otro lado, conductores extendidos tales como las pistas metálicas rectas que corren en la parte posterior de las placas aislantes en la fig. 1, también pueden tener una permitividad  $\epsilon$  negativa a frecuencias suficientemente bajas. Por lo tanto, ondas electromagnéticas pueden propagarse en un sistema como éste en donde  $\epsilon < 0$  y  $\mu < 0$ , pues la relación de dispersión (la relación entre la frecuencia y el vector de onda)  $k^2 = \epsilon\mu\omega^2/c^2$  para ondas electromagnéticas conduce a un número de onda  $k$  real para frecuencias  $\omega$  reales siempre y cuando el producto  $\epsilon\mu > 0$ . Aquí,  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío. Sin embargo, el campo eléctrico  $\mathbf{E}$ , la densidad de flujo magnético  $\mathbf{B}$  y el vector de onda  $\mathbf{k}$  forman una *triada ortogonal derecha* (son mutuamente perpendiculares y cuando los dedos de la mano derecha se mueven desde la dirección de  $\mathbf{E}$  hacia la de  $\mathbf{B}$ , el dedo pulgar apuntaría hacia  $\mathbf{k}$ ), mientras que el campo eléctrico  $\mathbf{E}$ , el magnético  $\mathbf{H}$  y el vector de Poynting  $\mathbf{S}$  (el flujo de energía) también forman una triada ortogonal derecha (fig. 1, derecha). Si  $\mu < 0$ , entonces  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$  apuntarían en direcciones opuestas y por tanto, también lo harían  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{S}$ . Recordando que los frentes de onda se mueven en la dirección de  $\mathbf{k}$  mientras que la energía fluye en la dirección de  $\mathbf{S}$ , encontramos que en estos llamados materiales izquierdos *los frentes de onda y la energía se mueven en direcciones opuestas*. Cuando la luz

\*Una versión traducida al inglés de este artículo fue enviada al Perl Science Journal.

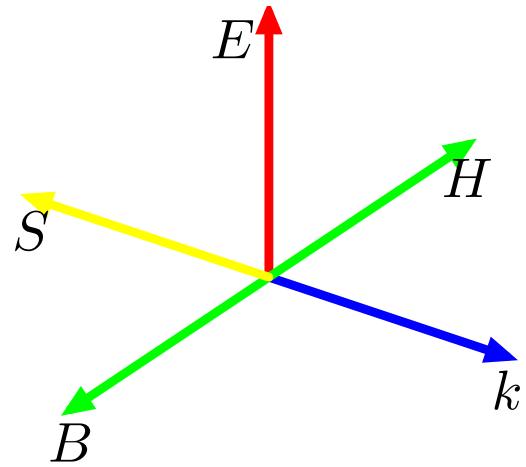
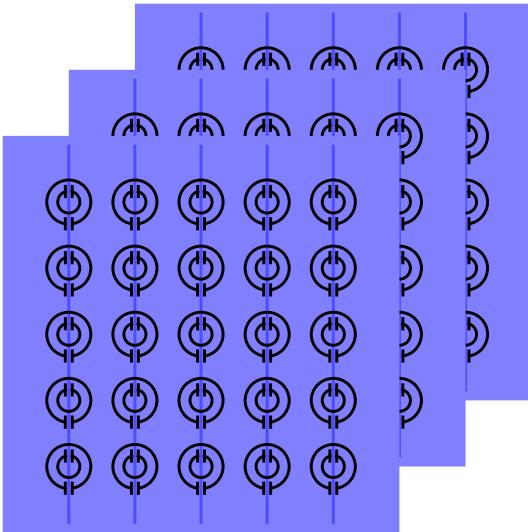


Figura 1: Metamaterial hecho de anillos partidos impresos de un lado de placas aislantes, con pistas rectas impresas en la parte posterior (izquierda). A ciertas frecuencias, este sistema puede tener una permitividad  $\epsilon$  negativa y un permeabilidad  $\mu$  negativa también, permitiendo la propagación de ondas electromagnéticas. Sin embargo, como la densidad de flujo magnético  $B$  y el campo magnético  $H$  apuntan en direcciones opuestas, también lo hacen el vector de onda  $k$  y el flujo de energía  $S$ .

ilumina la interfaz que separa dos materiales ordinarios, se divide en una onda reflejada y otra transmitida cuyos frentes de onda y energía se alejan de la interfaz (fig. 2 izquierda). Sin embargo, cuando la luz ilumina la interfaz que separa un material ordinario de un material izquierdo, los frentes de onda del campo transmitido se propagan hacia la interfaz, pues la energía de las ondas esparcidas deben necesariamente alejarse de la interfaz. Luego, la onda transmitida se refracta de acuerdo a la ley de Snell, pero con un índice de refracción negativo  $n = -\sqrt{\epsilon\mu}$  (fig. 2 derecha) [21]. No existen materiales naturales que muestren esta refracción negativa, de modo que ésta es una propiedad exótica que puede observarse en metamateriales diseñados y entonados adecuadamente.

Otro ejemplo de comportamiento exótico se halla en las *metasuperficies* formadas por *metaatomos*, es decir, partículas de un material depositadas sobre un sustrato. Si las partículas tienen un índice de refracción alto y su tamaño es comparable a la longitud de onda de la luz en su interior, pueden mostrar resonancias del tipo de las de Mie. Cuando luz con frecuencia cercana a la de estas resonancias atraviesa las partículas, su campo electromagnético es sujeto a un cambio de fase grande. Al cambiar gradualmente la geometría de las partículas a lo largo de la superficie, la fase que adquiere el campo puede ser manipulada. Esto puede emplearse para diseñar y construir dispositivos ultradelgados que deformen los frentes de onda del campo óptico. Por ejemplo, una *metaiente* puede enfocar luz retardando el campo cerca de su centro con respecto al campo cerca de sus orillas, análogamente a una lente positiva ordinaria de vidrio la cual es más ancha cerca de su centro y más delgada cerca de su borde. (Fig. 3) [2]. Otro sistema interesante es una *superred* periódica formada por películas apiladas (fig. 4, izquierda). El campo electromagnético reflejado múltiplemente por las interfaces podría sumarse coherenteamente en la dirección retrodispersada cuando se cumpla la condición de Bragg  $k = \pi/d$ , donde  $k$  es el número de onda y  $d$  el periodo. Esto impide la propagación de la luz y origina brechas en la relación de dispersión de los fotones (fig. 4, centro), i.e., intervalos de frecuencia en los cuales la luz no puede propagarse. Más allá de las brechas, la luz sí puede propagarse libremente a lo largo de bandas permitidas, pero con una relación de dispersión que difiere de aquella correspondiente a un medio homogéneo no dispersivo. Estructuras de *bandas fotónicas* similares, análogas a la estructura de bandas electrónicas de sólidos cristalinos, también pueden hallarse en estructuras artificiales periódicas en 2D y 3D (fig. 4, derecha). El estudio de estos *cristales fotónicos* fue motivado por la búsqueda de materiales sin disipación que tuviesen una brecha absoluta independiente de la dirección [22], que pudiera permitir atrapar luz. Añadir *defectos* a un cristal fotónico 2D permite guiar luz a lo largo de la tercera dimensión, dando origen a novedosas guías de onda que han encontrado aplicaciones en dispositivos fotónicos integrados [10].

Los sistemas descritos arriba son sólo algunos ejemplos que ilustran el desarrollo del campo de metamateriales ópticos y de cristales fotónicos, el cual ha permitido la manipulación de la luz y el desarrollo de novedosos dispositivos

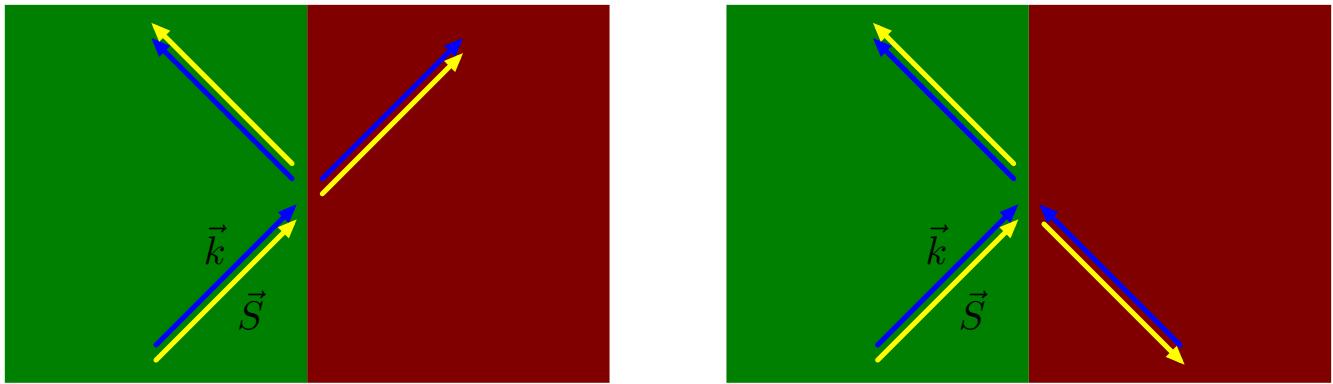


Figura 2: Dibujo esquemático del vector de onda  $\mathbf{k}$  (azul) y el flujo de energía  $\mathbf{S}$  (amarillo) de una onda electromagnética que ilumina la interfaz entre dos materiales ordinarios (izquierda) y entre un material ordinario y un material izquierdo (derecha), así como los de las ondas reflejadas y transmitidas correspondientes. La condición de que la energía de las ondas esparcidas se aleje de las interfaces produce refracción negativa para materiales izquierdos (una onda incidente moviéndose hacia arriba se acopla a frentes de ondas que suben, y por tanto a una onda refractada que se mueve hacia abajo).

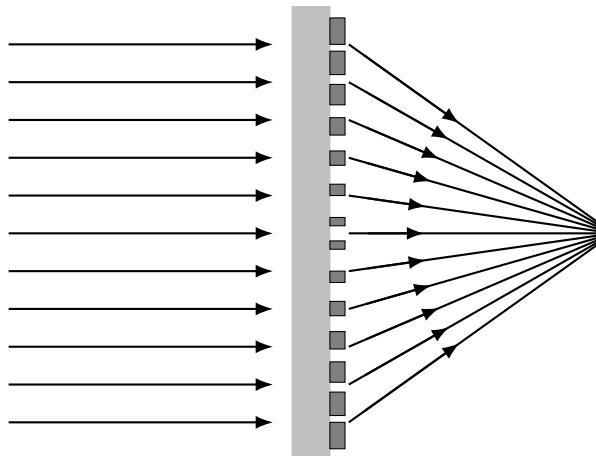


Figura 3: Vista lateral de una metalente. Las resonancias electromagnéticas de partículas de formas y tamaños adecuados depositados sobre una película modulan la fase de la luz que las atraviesa, retardando más al campo que pasa por el centro que aquel que pasa cerca de los bordes, de forma que los rayos son refractados y pueden ser enfocados como lo haría una lente ordinaria.

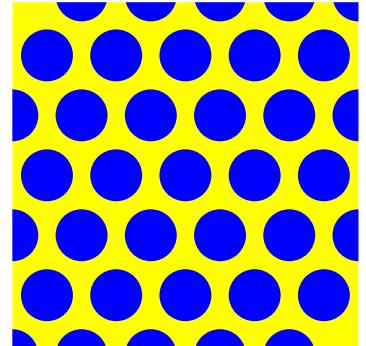
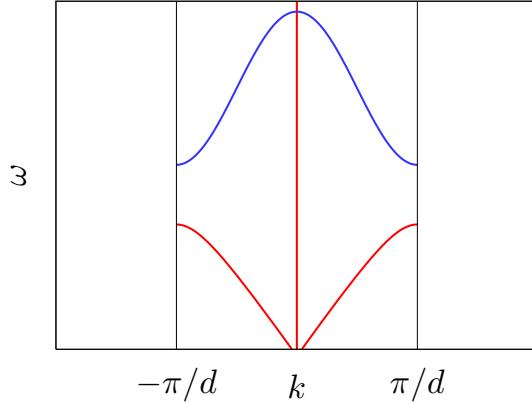
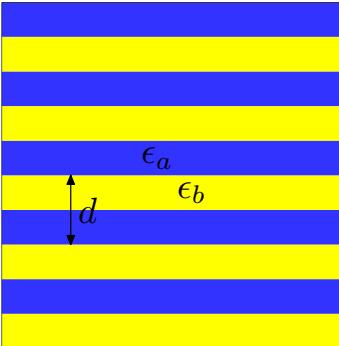


Figura 4: La luz multiplemente reflejada por las interfaces de una superred, un sistema de películas apiladas periódicamente (izquierda), se suma coherenteamente en la dirección retrodispersada cuando se cumple la condición de Bragg  $k = \pi/d$  is met, impidiendo su propagación y dando origen a brechas prohibidas en la relación de dispersión de la luz (centro) entre bandas permitidas. La periodicidad en dos y tres dimensiones produce estructuras de bandas similares, no muy distintas a las estructuras de bandas que describen la propagación de electrones en sólidos cristalinos.

ópticos miniatura. Un problema para entender, diseñar y entonar estos dispositivos es el desarrollo de modelos que permitan cálculos eficientes y precisos de sus propiedades electromagnéticas. Un posible procedimiento consiste en *homogenizar* la respuesta del sistema, es decir, en hallar las propiedades de un sistema homogéneo *efectivo*, un sistema translacionalmente invariante que tenga las mismas propiedades del sistema inhomogéneo original (fig. 5). Hemos desarrollado un formalismo teórico y lo hemos implementado en un paquete computacional que permite el cálculo preciso y eficiente de la respuesta dieléctrica macroscópica de metamateriales hechos de cualquier número de materiales de cualquier tipo, aislantes o conductores, transparentes u opacos, disipativos y dispersivos o no, cada uno caracterizado por su propio tensor de permitividad [14, 15]. El formalismo está basado en el procedimiento recursivo de Haydock, desarrollado para el cálculo de funciones de Green proyectadas sobre estados específicos [9].

La estructura del artículo es la siguiente. En la sec. 2 desarrollamos el esquema teórico, en la sec. 3 desarrollamos el esquema computacional para llevar a cabo los cálculos correspondientes, en la sec. 4 discutimos su implementación como una distribución en el lenguaje Perl, en la sec. 5 desarrollamos algunos ejemplos para ilustrar su uso, en la sec. 6 discutimos algunos resultados recientes y finalmente, en la sec. 7 presentamos nuestras conclusiones.

## 2. Teoría

La respuesta electromagnética de un sistema hecho de materiales no magnéticos puede caracterizarse por la permitividad  $\epsilon$ , definida a través de

$$\mathbf{D} = \hat{\epsilon} \mathbf{E}, \quad (1)$$

donde  $\mathbf{D}$  es el *desplazamiento eléctrico* y  $\mathbf{E}$  es el campo eléctrico, ambos de los cuales dependen en general de la posición  $\mathbf{r}$ . El *operador permitividad*  $\hat{\epsilon}$  corresponde a un tensor  $\epsilon(\mathbf{r})$  que depende también de la posición, pues toma distintos valores en las diferentes componentes que constituyen el sistema. Para simplificar algunas de las ecuaciones que siguen, es conveniente usar una operación de operadores en la que empleamos un gorrito, como en  $\hat{O}$ , para denotar un operador lineal, el cual puede ser tan simple como el producto por una constante, la multiplicación por alguna cantidad dependiente de la posición, un operador diferencial, un operador integral con cierto nucleo (kernel), etc. El uso de operadores abstractos tiene la ventaja de no requerir el especificar la dependencia en la posición explícitamente. Además, los campos tales y como  $\mathbf{E}$  or  $\mathbf{D}$  pueden representarse como funciones de la posición  $\mathbf{r}$ , pero a través de una transformada de Fourier, también podrían representarse como funciones del vector de onda. Es entonces conveniente evitar el uso de una representación específica cuando es posible y emplear campos y operadores abstractos. Deseamos encontrar la respuesta macroscópica  $\hat{\epsilon}_M$ , tal que

$$\mathbf{D}_M = \hat{\epsilon}_M \mathbf{E}_M, \quad (2)$$

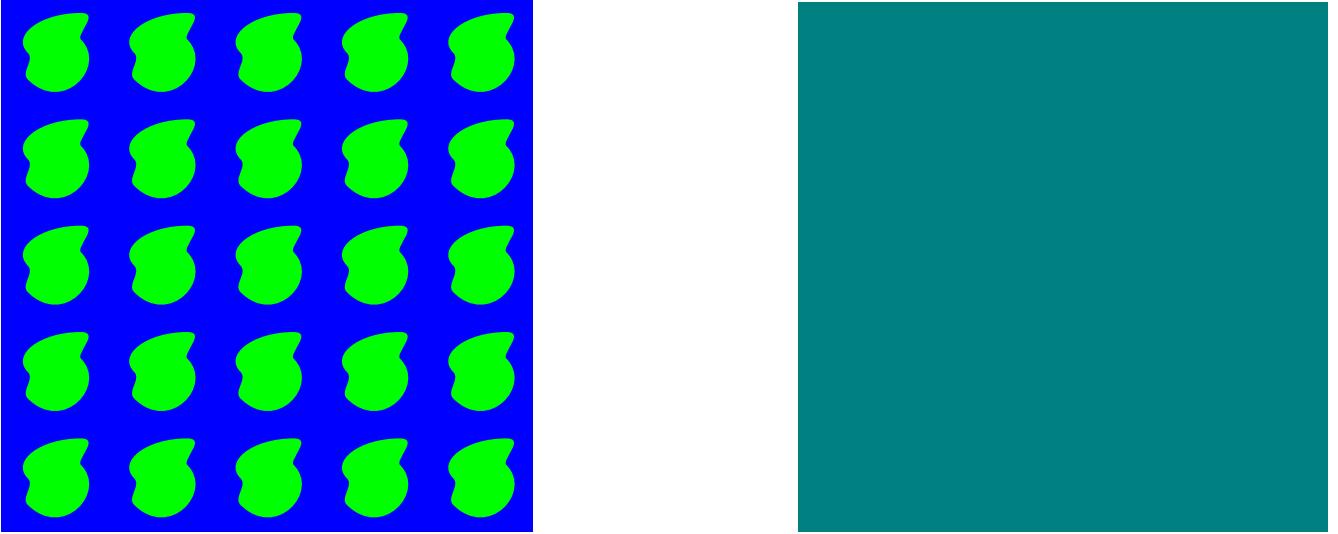


Figura 5: Un metamaterial (izquierda) hecho de un arreglo de dos o más componentes caracterizadas por sus propias propiedades dieléctricas y su geometría puede reemplazarse por un sistema homogéneo (derecha) con una respuesta macroscópica  $\hat{\epsilon}_M$  obtenida a través de una teoría de homogenización.

donde  $\mathbf{D}_M$  y  $\mathbf{E}_M$  son el desplazamiento y el campo eléctrico macroscópicos obtenidos mediante un promedio de  $\mathbf{D}$  y  $\mathbf{E}$ , i.e.,  $\mathbf{F}_M \equiv \langle \mathbf{F} \rangle \equiv \hat{\mathcal{P}}_a \mathbf{F} \equiv \mathbf{F}_a$ , donde  $\mathbf{F}$  es un campo cualquiera y  $\hat{\mathcal{P}}_a$  es un operador que toma el promedio. Existen muchos procedimientos para definir un promedio. Aquí elegimos uno que filtra al campo en el espacio recíproco, es decir, un operador que remueve componentes de Fourier altas de la transformada de Fourier  $\mathbf{F}(\mathbf{k})$  de  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ , i.e.,  $\mathbf{F}_a(\mathbf{k}) = 0$  para vectores  $\mathbf{k}$  que puedan considerarse grandes, mientras que  $\mathbf{F}_a(k) = \mathbf{F}(k)$  para otros. Este promedio cumple con la condición de ser *idempotente* [16],  $\hat{\mathcal{P}}_a^2 = \hat{\mathcal{P}}_a$ , es decir, el promedio del promedio es simplemente el promedio mismo. De forma similar, definimos un operador *fluctuación*  $\hat{\mathcal{P}}_f = \hat{1} - \hat{\mathcal{P}}_a$ , tal que  $\hat{\mathcal{P}}_f^2 = \hat{\mathcal{P}}_f$ . Además,  $\hat{\mathcal{P}}_a \hat{\mathcal{P}}_f = \hat{\mathcal{P}}_f \hat{\mathcal{P}}_a = 0$ . Luego,  $\hat{\mathcal{P}}_a$  y  $\hat{\mathcal{P}}_f$  son proyectores y podemos representar cualquier campo como si fuera un 2-vector

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_a \\ \mathbf{F}_f \end{pmatrix}, \quad (3)$$

cada una de cuyas *componentes* es en sí misma un campo. Usando esta representación, la respuesta del sistema puede representarse como una matriz de  $2 \times 2$  como

$$\hat{\epsilon} = \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{aa} & \hat{\epsilon}_{af} \\ \hat{\epsilon}_{fa} & \hat{\epsilon}_{ff} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

donde  $\hat{\epsilon}_{\alpha\beta} \equiv \hat{\mathcal{P}}_\alpha \hat{\epsilon} \hat{\mathcal{P}}_\beta$ . En la ec. (4) hay términos que acoplan promedios con promedios, fluctuaciones con promedios, promedios con fluctuaciones y fluctuaciones con fluctuaciones. Empleando la ec. (4) en la ec. (1) obtenemos

$$\mathbf{D}_a = \hat{\epsilon}_{aa} \mathbf{E}_a + \hat{\epsilon}_{af} \mathbf{E}_f. \quad (5)$$

Una comparación con la ec. (2) muestra que la respuesta macroscópica  $\hat{\epsilon}_M$  no es simplemente el promedio  $\hat{\epsilon}_{aa}$  de la respuesta microscópica  $\hat{\epsilon}$  correspondiente, pues hay una contribución de las fluctuaciones del campo eléctrico microscópico al desplazamiento macroscópico. Estas correcciones corresponden al *efecto de campo local* [16].

Para obtener la respuesta macroscópica, podríamos resolver las ecuaciones de Maxwell para obtener las fluctuaciones del campo eléctrico  $\mathbf{E}_f$  en términos del campo macroscópico  $\mathbf{E}_a$ , sustituirlo en la ec. (5) y finalmente identificar la respuesta macroscópica. Sin embargo, hay procedimientos más directos y económicos basados en la identificación de algún operador cuyo promedio tenga un significado físico y a partir del cual podamos obtener la permitividad macroscópica. Esto puede ilustrarse de la forma más simple en el límite no retardado, en el cual la textura del metamaterial, el tamaño de las partículas que lo componen y la distancia entre partículas vecinas, tienen una escala de distancias  $d$  tan pequeña que podemos ignorar el retardamiento, el tiempo  $d/c$  que le toma al campo electromagnético moverse a través de la partícula o de una a otra a la velocidad de la luz  $c$ . Éste sería el caso

para campos con frecuencia  $\omega$  cuya longitud de onda correspondiente  $\lambda = 2\pi c/\omega$  es mucho mayor que  $d$ ,  $d \ll \lambda$ . Formalmente, podemos explorar este límite tomando el límite  $c \rightarrow \infty$  en las ecuaciones de Maxwell, en cuyo caso el campo eléctrico obedecería  $\hat{\nabla} \times \mathbf{E} = 0$  y  $\hat{\nabla} \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$ . La primera de estas ecuaciones establece que  $\mathbf{E} = \mathbf{E}^L$  es un campo *longitudinal* (irrotacional), y la segunda muestra que la fuente del campo eléctrico es la densidad total de carga  $\rho$ , la cual incluye a la carga  $\rho^{\text{ind}}$  inducida en el sistema debido a la polarización de sus materiales, es decir, al movimiento relativo de las cargas que forman al sistema y de las cargas externas con densidad  $\rho^{\text{ex}}$  que fuesen empleadas para excitar al sistema. Recordemos que de acuerdo al teorema de Helmholtz, cualquier campo vectorial  $\mathbf{F} = \mathbf{F}^L + \mathbf{F}^T$  puede expresarse como la suma de un campo longitudinal  $\mathbf{F}^L = \hat{\mathcal{P}}^L \mathbf{F} = \hat{\nabla} \hat{\nabla}^{-2} \hat{\nabla} \cdot \mathbf{F}$  y un campo transversal (solenoidal)  $\mathbf{F}^T = \hat{\mathcal{P}}^T \mathbf{F} = -\hat{\nabla} \times (\hat{\nabla}^{-2} \hat{\nabla} \times \mathbf{F})$ , tal que  $\hat{\nabla} \times \mathbf{F}^L \equiv 0$  y  $\hat{\nabla} \cdot \mathbf{F}^T \equiv 0$ . Aquí,  $\hat{\nabla}$  corresponde en el espacio real al operador diferencial  $\nabla = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$  con  $\partial_\alpha$  denotando derivada parcial con respecto a la variable  $\alpha = x, y$ , o  $z$ , y  $\hat{\nabla}^{-2}$  denota el inverso del operador Laplaciano  $\nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$ , representado en el espacio real por un operador integral cuyo kernel es el inverso de la distancia, en analogía al potencial Coulombiano empleado en electrostática, i.e.,

$$(\hat{\nabla}^{-2} f)(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 r' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} f(\mathbf{r}'). \quad (6)$$

En el espacio recíproco  $\hat{\nabla}$  corresponde a multiplicar por la unidad imaginaria  $i$  y el vector de onda  $\mathbf{k}$ , mientras que  $\hat{\nabla}^{-2}$  corresponde a multiplicar por  $-1/k^2$ . Así, la transformada de Fourier de  $\nabla f(\mathbf{r})$  es  $i\mathbf{k}f(\mathbf{k})$ , mientras que la transformada de Fourier de la ec. (6) es  $-f(\mathbf{k})/k^2$ . Notemos que  $\hat{\mathcal{P}}^L$  y  $\hat{\mathcal{P}}^T$  son idempotentes,  $(\hat{\mathcal{P}}^L)^2 = \hat{\mathcal{P}}^L$  y  $(\hat{\mathcal{P}}^T)^2 = \hat{\mathcal{P}}^T$ , y que  $\hat{\mathcal{P}}^L \hat{\mathcal{P}}^T = \hat{\mathcal{P}}^T \hat{\mathcal{P}}^L = 0$ , por lo que pueden considerarse como *projectores* sobre espacios complementarios, análogamente a los operadores promedio  $\hat{\mathcal{P}}_a$  y fluctuaciones  $\hat{\mathcal{P}}_f$  como fue discutido arriba.

Podemos aplicar el procedimiento de Helmholtz al desplazamiento,  $\mathbf{D} = \mathbf{D}^L + \mathbf{D}^T$ , y notar que  $\mathbf{D}^L$  cumple las mismas ecuaciones que el campo eléctrico *externo*, esto es,  $\hat{\nabla} \times \mathbf{D}^L = 0$ , y  $\hat{\nabla} \cdot \mathbf{D}^L = \hat{\nabla} \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho^{\text{ex}}$ . Luego, la parte longitudinal del desplazamiento *es* el campo eléctrico externo, cuyas fuentes son únicamente las cargas externas, sin relación alguna con las cargas de polarización, y por lo tanto, sin relación alguna con las fluctuaciones debidas a la textura de la permitividad microscópica. Por esta razón,  $\mathbf{D}^L$  no tiene fluctuaciones espaciales y

$$\mathbf{D}^L = \mathbf{D}_a^L = \mathbf{D}_M^L. \quad (7)$$

La proyección longitudinal de la ec. (1) puede ser escrita como  $\mathbf{D}^L = \hat{\epsilon}^{LL} \mathbf{E}^L + \hat{\epsilon}^{LT} \mathbf{E}^T = \hat{\epsilon}^{LL} \mathbf{E}^L$ , pues  $\mathbf{E}^T = 0$  en el límite no retardado, donde  $\epsilon^{\alpha\beta} = \hat{\mathcal{P}}^\alpha \hat{\epsilon} \hat{\mathcal{P}}^\beta$ , con  $\alpha, \beta = L, T$ . Resolviendo para  $\mathbf{E}^L$ ,

$$\mathbf{E}^L = (\hat{\epsilon}^{LL})^{-1} \mathbf{D}^L, \quad (8)$$

donde  $(\hat{\epsilon}^{LL})^{-1}$  debe ser interpretado como la inversa de la proyección longitudinal de la permitividad restringida a actuar sobre el subespacio de campos longitudinales (sin esta restricción, el operador no sería invertible). Finalmente, promediando la ec. (8) y empleando (7) obtenemos

$$\mathbf{E}_M^L = (\hat{\epsilon}_M^{LL})_{aa}^{-1} \mathbf{D}_M^L, \quad (9)$$

de donde identificamos

$$(\hat{\epsilon}_M^{LL})_{aa}^{-1} = (\hat{\epsilon}^{LL})_{aa}^{-1}, \quad (10)$$

i.e., la inversa de la proyección longitudinal de la permitividad macroscópica es el promedio de la inversa de la proyección longitudinal de la permitividad microscópica [21, 14].

Podemos ir más allá del régimen no retardado y generalizar el resultado anterior estableciendo que la respuesta macroscópica a una excitación externa es simplemente el promedio de la respuesta microscópica correspondiente.

### 3. Esquema computacional

Hemos desarrollado un formalismo para el cálculo eficiente de la respuesta macroscópica de metamateriales empleando el esquema recursivo de Haydock [9]. Aquí lo ilustraremos para el caso simple de un metamaterial binario, un sistema hecho de dos materiales que se alternan periódicamente, tal como una red de partículas hechas de algún material  $B$  con una respuesta dieléctrica isotrópica  $\epsilon_B$  en el seno de un material anfitrión  $A$  con una respuesta  $\epsilon_A$  (fig. 6). La respuesta microscópica del sistema puede escribirse como

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon_A - \epsilon_{AB} B(\mathbf{r}), \quad (11)$$

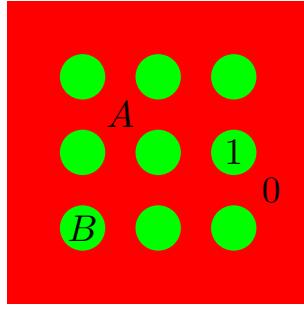


Figura 6: Metamaterial binario periódico formado por una red periódica de partículas (verde) de un material  $B$  en el seno de un medio (rojo) hecho de un material  $A$ . Los valores (0,1) de la función característica  $B(\mathbf{r})$  se muestran para dos posiciones.

donde  $\epsilon_{AB} = \epsilon_A - \epsilon_B$  e introducimos la función *característica*,

$$B(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r} \text{ está en alguna inclusión,} \\ 0 & \text{se } \mathbf{r} \text{ está en el anfitrión,} \end{cases} \quad (12)$$

una función periódica de la posición  $\mathbf{r}$ , i.e.,  $B(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = B(\mathbf{r})$  para cualquier posición  $\mathbf{r}$  y cualquier vector de la red  $\mathbf{R}$ , donde el conjunto de vectores  $\{\mathbf{R}\}$  forma una red de Bravais [3]. Notamos que  $B(\mathbf{r})$  caracteriza la *geometría* del sistema, las formas de las partículas y su disposición, pero es independiente de la composición y de las funciones respuesta de las componentes.

Factorizando  $\epsilon_{AB}$  en la ec. (11) nos permite escribirla como

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \frac{\epsilon_A}{u}(u - B(\mathbf{r})), \quad (13)$$

donde introdujimos la *variable espectral*

$$u = (1 - \epsilon_B/\epsilon_A)^{-1}. \quad (14)$$

Su valor es en general un número complejo que depende de la composición del metamaterial y de la frecuencia  $\omega$ , pero no tiene que ver con su geometría. De esta forma, en la ec. (13) la geometría y la composición han sido factorizadas. De acuerdo a las ecs. (10) y (13), la respuesta macroscópica puede obtenerse de

$$(\boldsymbol{\epsilon}_M^{LL})^{-1} = \frac{u}{\epsilon_A}(u - \hat{B}^{LL})^{-1}. \quad (15)$$

De acuerdo al teorema de Bloch [3], todas las excitaciones en un sistema periódico pueden escribirse en términos de ondas de Bloch de la forma

$$\mathbf{F}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{F}_{\mathbf{k}\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}}, \quad (16)$$

donde  $\mathbf{k}$  es el *vector de Bloch*, análogo al vector de onda de una onda plana ordinaria, y  $\mathbf{G}$  son miembros de la *red reciproca*  $\{\mathbf{G}\}$  definida como el conjunto de vectores de onda tales que  $e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1$  para cualquier vector de la red  $\mathbf{R}$ . Notamos que  $\mathbf{F}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \mathbf{F}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , de manera que  $\mathbf{F}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  cambia por una simple fase  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}$  tras una translación por un vector de la red, al igual como lo haría una simple onda plana con vector de onda  $\mathbf{k}$ . Así que una onda de Bloch es como una onda plana modulada por oscilaciones espaciales rápidas  $e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$  con longitudes de onda que son iguales o submúltiplos del tamaño de una celda unitaria. En el límite no retardado, esperamos un vector de Bloch  $\mathbf{k}$  pequeño, correspondiente cambio de fase menor a través de una celda unitaria, y una longitud de onda larga del orden de la longitud de onda del campo en el espacio vacío. Luego, podemos definir el proyector promedio en espacio reciproco deshaciéndonos simplemente de todas las componentes de Fourier con vectores recíprocos no nulos. Así, el proyector promedio quedaría representado por una matriz en espacio reciproco con elementos

$$(\mathcal{P}_a)_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \delta_{\mathbf{G}\mathbf{0}} \delta_{\mathbf{G}'\mathbf{0}}, \quad (17)$$

tal que, actuando en una onda de Bloch (16) produce una la onda plana  $(\mathbf{F}_{\mathbf{k}})_a(\mathbf{r}) = \mathbf{F}_{\mathbf{k}\mathbf{0}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  con una variación lenta. En otras palabras, una onda plana con un vector de onda pequeño  $\mathbf{k}$  propagándose en el seno de un sistema

periódico es esparcida en otras ondas planas con vectores de onda grandes  $\mathbf{k} + \mathbf{G}$  que se esparcen entre ellas y de regreso a una onda plana con el vector de onda original  $\mathbf{k}$ . Promediar significa deshacernos de todos los campos esparcidos que varían rápido, pero conservando sus efectos en el campo que varía lento con el vector de onda original  $\mathbf{k}$ .

Usando las ecs. (15) y (17) obtenemos

$$\frac{1}{\hat{\mathbf{k}} \cdot \epsilon_M \cdot \hat{\mathbf{k}}} = \frac{u}{\epsilon_a} (u - \mathbf{B}^{LL})_{00}^{-1}, \quad (18)$$

donde  $\mathbf{B}^{LL}$  denota una matriz en espacio recíproco con componentes

$$B_{\mathbf{GG}'}^{LL} = \hat{\mathbf{G}} \cdot B_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \hat{\mathbf{G}}', \quad (19)$$

y  $B_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}$  es el coeficiente de Fourier de la función periódica  $B(\mathbf{r})$  correspondiente al vector de onda  $\mathbf{G} - \mathbf{G}'$ . Hemos usado que el proyector longitudinal en espacio recíproco es simplemente la proyección a lo largo de la dirección  $(\mathbf{k} + \mathbf{G})/|\mathbf{k} + \mathbf{G}| = \hat{\mathbf{G}}$  del vector de onda. Hemos usado además que en el límite no retardado,  $k \ll G$  para vectores recíprocos no nulos, y definimos  $\hat{\mathbf{0}} \equiv \hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$ , i.e., la dirección del vector de Bloch relativamente chico, correspondiente al vector recíproco nulo  $\mathbf{G} = \mathbf{0}$ . También introdujimos una simplificación sutil al identificar la *proyección* longitudinal de un operador con su *componente* longitudinal.

El lado derecho de la ec. (18) no difiere mucho de la definición usual de una función de Green proyectada sobre un estado dado  $|0\rangle$ ,

$$\mathcal{G}_{00} = \langle 0 | (\varepsilon - \hat{H})^{-1} | 0 \rangle, \quad (20)$$

como es usado comúnmente en mecánica cuántica (MC), donde  $\hat{H}$  sería el hamiltoniano del sistema, un operador *hermitiano* correspondiente a la energía, empleamos la notación de *brakets* de Dirac, y  $\varepsilon$  es una variable compleja. Recordemos que en MC,  $|a\rangle$  denota un estado abstracto correspondiente a una función de onda  $\psi_a(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | a \rangle$  en espacio real. Sin embargo, el mismo estado puede ser representado por la función  $\psi_a(\mathbf{G}) \equiv \langle \mathbf{G} | a \rangle$  en el espacio recíproco. Aquí,  $\psi_a(\mathbf{r})$  es interpretada como una amplitud de probabilidad de que el estado  $|a\rangle$  se encuentre en la posición  $\mathbf{r}$ , i.e.,  $|\psi_a(\mathbf{r})|^2$  es la densidad de probabilidad en  $\mathbf{r}$ , mientras que  $\psi_a(\mathbf{G})$  es la amplitud de probabilidad de que el estado  $|a\rangle$  sea una onda plana con vector de onda  $\mathbf{G}$ . De manera más general,  $\langle b | a \rangle$  es la amplitud de probabilidad de que un sistema en el estado  $|a\rangle$  se encuentre al ser observado en un estado  $|b\rangle$ , siendo  $|\langle b | a \rangle|^2$  la probabilidad misma. Como  $\psi_a(\mathbf{r})$  puede mapearse a  $\phi_a(\mathbf{G})$  a través de una transformación de Fourier y viceversa, las representaciones en espacio real y en espacio recíproco de un estado, así como otras posibles representaciones, tienen información equivalente. Luego, es conveniente abstraerse de las funciones de onda y referirse a estados abstractos tales y como  $|a\rangle$ . También recordemos que un operador  $\hat{\mathcal{O}}$  es *hermitiano* si  $\langle b | \hat{\mathcal{O}} | a \rangle = \langle a | \hat{\mathcal{O}} | b \rangle^*$  para cualquier par de estados  $|a\rangle$  y  $|b\rangle$ , donde el asterisco denota al complejo conjugado. Resulta ser que en MC todas las observables físicas corresponden a operadores hermitianos.

A continuación emplearemos el lenguaje y las técnicas de la MC, pero evitaremos la interpretación correspondiente, pues estamos tratando con problemas de electromagnetismo clásico. De acuerdo a las ecs. (18) y (20), podemos tomar prestadas técnicas empleadas usualmente para obtener funciones de Green proyectadas en MC y aplicarlas al cálculo de la permitividad macroscópica. En particular, adoptamos el procedimiento de Haydock [9]. El procedimiento original consiste en aplicar el hamiltoniano  $\hat{H}$  del sistema a un estado elegido  $|0\rangle$  y ortogonalizar el resultado al estado inicial para hallar un nuevo estado normalizado  $|1\rangle$ , i.e.,  $\hat{H}|0\rangle = b_1|1\rangle + a_0|0\rangle$ . El procedimiento es entonces iterado, produciendo sucesivamente los estados  $|2\rangle, |3\rangle \dots$ , tales que  $\hat{H}|n\rangle = b_{n+1}|n+1\rangle + a_n|n\rangle + b_n|n-1\rangle$  ortonormalizados de forma que  $\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$ , la delta de Kronecker. Notamos que  $|n-2\rangle, |n-3\rangle \dots$  no aparecen en la expansión de  $\hat{H}|n\rangle$  debido al carácter hermitiano del operador  $\hat{H}$ .

Este procedimiento produce una base  $\{|n\rangle\}$  en la cual el hamiltoniano  $\hat{H}$  puede representarse por una matriz tridiagonal con entradas  $H_{nm} = \langle n | \hat{H} | m \rangle$  dadas por los coeficientes de Haydock  $a_n$  y  $b_n$ ,

$$(H_{nm}) = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & \cdots \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & \cdots \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Luego, la función de Green proyectada es sólo una componente, aquella en la esquina superior izquierda, de la

1. Multiplica  $\psi_n(\mathbf{G})$ , la función de onda en el espacio recíproco correspondiente al estado  $|n\rangle$ , por  $\hat{\mathbf{G}}$ ,  $\psi_n(\mathbf{G}) = \hat{\mathbf{G}}\psi_n(\mathbf{G})$  (note que empleamos símbolos en negritas para representar cantidades vectoriales).
2. Multiplica por  $B_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}$  y suma sobre  $\mathbf{G}'$ ,  $\phi_{n+1}(\mathbf{G}) = \sum_{\mathbf{G}'} B_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}\psi_n(\mathbf{G}')$ .
3. Toma el producto escalar con  $\hat{\mathbf{G}}$ ,  $\phi_{n+1}(\mathbf{G}) = \hat{\mathbf{G}} \cdot \phi_{n+1}(\mathbf{G})$ .
4. Ortogonaliza con  $\psi_n(\mathbf{G})$  y  $\psi_{n-1}(\mathbf{G})$  restando las proyecciones correspondientes,  $b_{n+1}\psi_{n+1}(\mathbf{G}) \equiv (\phi_{n+1}(\mathbf{G}) - a_n\psi_n(\mathbf{G}) - b_n\psi_{n-1}(\mathbf{G}))/b_{n+1}$ , con  $a_n = \sum_{\mathbf{G}} \psi_n^*(\mathbf{G})\phi_{n+1}(\mathbf{G})$ .
5. Elije la constante de normalización  $b_{n+1}$  de forma que  $\psi_{n+1}$  esté normalizada,  $\sum_{\mathbf{G}} |\psi_{n+1}(\mathbf{G})|^2 = 1$ .
6. Finalmente, obtén la nueva función de onda  $\psi_{n+1}(\mathbf{G}) = (\phi_{n+1}(\mathbf{G}) - a_n\psi_n(\mathbf{G}) - b_{n-1}\psi_{n-1}(\mathbf{G}))/b_{n+1}$ .
7. Asigna  $n \leftarrow n + 1$ .
8. Empieza de nuevo en el paso 1.

Figura 7: Pasos para obtener los coeficientes de Haydock para un metamaterial binario en el límite no retardado.

- 2a. Realiza una transformada de Fourier de  $\psi_n(\mathbf{G})$  hacia el espacio real para obtener  $\psi_n(\mathbf{r})$ .
- 2b. Multiplica por la función característica,  $\phi_{n+1}(\mathbf{r}) = B(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r})$ .
- 2c. Transforma de regreso al espacio recíproco para obtener  $\phi_{n+1}(\mathbf{G})$ .

Figura 8: Modificación al paso 2 de la fig. 7

inversa de la matriz tridiagonal  $\varepsilon\delta_{nm} - H_{nm}$ , y puede ser calculada como una simple fracción continuada

$$\langle 0 | \hat{G} | 0 \rangle = \langle 0 | (\varepsilon - \hat{H})^{-1} | 0 \rangle = \frac{1}{\varepsilon - a_0 - \frac{b_1^2}{\varepsilon - a_1 - \frac{b_2^2}{\varepsilon - a_2 - \ddots}}} \quad (22)$$

En la ec. (18) el papel del hamiltoniano es tomado por la componente longitudinal de la función característica, ec. (19), la cual es hermitiana, pues la transformada de Fourier de una función real  $B(\mathbf{r})$  obedece  $B_{\mathbf{G}'-\mathbf{G}} = B_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}^*$  para cualquier par de vectores recíprocos  $\mathbf{G}$  y  $\mathbf{G}'$ . Podemos entonces identificar al estado inicial  $|0\rangle$  con el estado *macroscópico*, i.e., una onda plana con un vector de onda pequeño  $\mathbf{k}$  en la dirección  $\hat{\mathbf{k}}$  y sin ninguna otra onda componente en forma de onda plana. Usando  $|\mathbf{G}\rangle$  para denotar un estado normalizado correspondiente a una onda plana con vector de onda  $\mathbf{k} + \mathbf{G} \approx \mathbf{G}$ , el estado inicial corresponde a la *función de onda*  $\psi_0(\mathbf{G}) \equiv \langle \mathbf{G} | 0 \rangle = \delta_{\mathbf{G},0}$ . La acción de nuestro *hamiltoniano* (19) sobre un estado dado  $|n\rangle$  caracterizado por una función de onda  $\psi_n(\mathbf{G}) = \langle \mathbf{G} | n \rangle$  en el espacio recíproco, y el cálculo de los coeficientes de Haydock, puede llevarse a cabo siguiendo los pasos detallados en la fig. 7.

Notamos que el paso 2 parecería tomar un tiempo de orden  $N^2$ , donde  $N$  es el número de vectores recíprocos empleado en el cálculo. Sin embargo, podemos identificar la suma como una *convolución*. Como la transformada de Fourier de una convolución es un simple producto, podemos reemplazar el paso 2 por los pasos modificados mostrados en la fig. 8. De esta manera, podemos obtener los coeficientes de Haydock sin requerir multiplicación

matricial alguna, moviéndonos de ida y vuelta entre el espacio recíproco y el espacio real. El tiempo tomado por cada paso sería entonces del orden  $N \log N$ .

Habiendo obtenido los coeficientes de Haydock, podemos obtener la respuesta macroscópica empleando las ecs. (18) y (22),

$$\hat{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_M \cdot \hat{\mathbf{k}} = \frac{\epsilon_A}{u} \left( u - a_0 - \frac{b_1^2}{u - a_1 - \frac{b_2^2}{u - a_2 - \ddots}} \right). \quad (23)$$

Usando la ec. (23) repetidamente para varias elecciones de la dirección  $\hat{\mathbf{k}}$ , podemos generar suficientes ecuaciones de la forma  $\hat{k}_i \epsilon_M^{ij} \hat{k}_j = \dots$  para permitirnos obtener todas las componentes cartesianas  $\epsilon_M^{ij}$  del tensor de permeabilidad macroscópico  $\boldsymbol{\epsilon}_M$ . Habiendo obtenido los coeficientes de Haydock  $\{a_n\}$  and  $\{b_n\}$  para una geometría dada, podemos repetir el cálculo para cualquier frecuencia  $\omega$  y cualquier par de materiales  $A$  y  $B$  simplemente sustituyendo el valor apropiado de la variable espectral  $u$  en la ec. (23).

## 4. Implementación

Hemos implementado el esquema descrito arriba en un paquete computacional llamado *Photonic* [13] disponible como una distribución en el *Comprehensive Perl Archive Network* (CPAN) y en *Github*. Además del caso de metamateriales binarios en el límite no retardado de longitud de onda larga, hemos implementado soluciones análogas para situaciones más generales como el caso binario con retardamiento, en cuyo caso la longitud de onda es comparable e incluso menor que el tamaño de la celda unitaria [18]. En este caso, el operador que puede promediarse está relacionado con el inverso del operador de onda, y la permitividad macroscópica resulta ser no local y muestra dispersión espacial, además de temporal, es decir, depende de manera independiente del vector de onda y de la frecuencia. De la dependencia en el vector de onda se puede obtener la permeabilidad magnética  $\mu_M$  de metamateriales hechos de materiales no magnéticos [11] de acuerdo con el esquema de Landau-Lifshitz [1]. También hemos extendido la teoría a metamateriales multicomponentes hechos de más de dos materiales. En este caso no es posible definir funciones características y por tanto, no hay un operador hermitiano que juegue el papel de un hamiltoniano. Sin embargo, redefiniendo el producto interno entre estados, hallamos operadores simétricos que pueden ser representados por matrices tridiagonales halladas mediante recursiones de Haydock, permitiendo el cálculo eficiente de la respuesta macroscópica tanto en el caso no retardado [15] como en el retardado [17]. La representación tridiagonal de operadores electromagnéticos relevantes es útil no sólo para la homogenización de la respuesta, sino también para calcular el campo electromagnético microscópico y a partir del mismo, la respuesta no lineal del sistema [12].

La distribución *Photonic* fue programada en Perl, pues es un lenguaje muy poderoso y expresivo. La implementación de los aspectos numéricos del paquete fue realizada empleando la extensión denominada *Perl Data Language* (PDL) [8, 7], pues permite operaciones eficientes entre arreglos multidimensionales (arreglos *nd* o *ndarrays*) con una velocidad comparable a la de programas escritos en C, C++ o Fortran; de hecho, provee de infraestructura para el uso de librerías matemáticas firmemente establecidas y escritas en dichos lenguajes, accesibles desde programas escritos en Perl. Además, permite emitir (*broadcast*) operaciones definidas sobre escalares o sobre arreglos *nd* con un número relativamente pequeño de dimensiones sobre todas las dimensiones excedentes cuando los argumentos son de alta dimensionalidad, evitando la necesidad de escribir repetidamente bucles explícitos sujetos a posibles errores, y permitiendo su parallelización automática. Como se mencionó arriba, hemos implementado algoritmos para calcular la respuesta macroscópica de metamateriales hechos de materiales arbitrarios, disipativos o no, opacos o transparentes, con o sin dispersión, con una geometría arbitraria y en un espacio con un número arbitrario de dimensiones, tanto en el caso no retardado como en el caso retardado, empleando el formalismo de Haydock para representar operadores como la proyección longitudinal de la permitividad o el operador de onda. También hemos obtenido los campos microscópicos y la respuesta óptica no lineal. Para cada uno de estos casos tuvimos que calcular los coeficientes de Haydock, usarlos para calcular diversas proyecciones de la respuesta macroscópica en términos de fracciones continuadas y obtener los tensores respuesta a partir de dichas proyecciones. Además, los cálculos requieren representar campos escalares, vectoriales y/o tensoriales en el espacio real y recíproco, pasando de una a otra representación mediante transformaciones de Fourier. Los campos son representados en el espacio como funciones de coordenadas espaciales discretizadas, asignando valores a cada *voxel* o elemento de volumen, en analogía a imágenes ordinarias que pueden ser interpretadas como campos en un espacio 2D pixelado. Las representaciones

```

1 sub iterate { #single Haydock iteration
2     my $self=shift;
3     return 0 if $self->converged;
4     ...
5     my $psi_n=$self->current_state;
6     my $opPsi=$self->applyOperator($psi_n);
7     my $a_n=$g_n*$self->innerProduct($psi_n, $opPsi);
8     my $bpsi_np1=$opPsi-$a_n*$psi_n-$c_n*$psi_nm1;
9     ...
10    my $b2_np1=$self->innerProduct($bpsi_np1, $bpsi_np1);
11    ...
12    my $b_np1=sqrt($b2_np1);
13    ...
14    my $psi_np1;
15    $psi_np1=$bpsi_np1/$b_np1 unless ...
16    ...
17 }

```

Figura 9: Fragmento dle método `iterate` del rol Haydock.

en espacio recíproco se obtienen a través de transformadas rápidas de Fourier, con un conjunto finito de vectores recíprocos, tantos como posiciones discretas contenga una celda unitaria.

Para evitar codificar rutinas similares repetidamente para llevar a cabo tareas similares bajo circunstancias ligeramente distintas, como discutimos arriba (sistemas binarios o multicomponentes, con o sin retardamiento, etc.), empleamos un paradigma de *programación orientada a objetos* (POO), empleando para ello el sistema Moo(se) [5, 20], y empleamos *Roles* para encapsular comportamientos compartidos. Por ejemplo, hay un módulo `Photonic::Roles::Geometry` consumido por varias clases `Geometry` que guardan y procesan información relacionada con la geometría del sistema. Un objeto `Geometry` puede ser inicializado a partir de una función característica, a partir de una imagen pixelada de alto contraste (en 2D), a partir de una permitividad escalar que asigna un valor complejo de la permitividad a cada voxel, o a partir de una permitividad tensorial que asigna un tensor con entradas complejas a cada voxel. Por tanto, hay módulos correspondientes llamados `Photonic::Geometry::FromB`, `...::FromImage2D`, `...::FromEpsilon` y `...::FromEpsilonTensor`. Otros parámetros que caracterizan a la geometría son la longitud de la celda unitaria a lo largo de diferentes direcciones (por omisión, el tamaño de la dimensión correspondiente del arreglo `nd` que la representa) y las direcciones de los vectores primitivos (las direcciones cartesianas por omisión). Hay métodos para regresar los vectores primitivos mismos, sus versiones normalizadas, la base dual normalizada (los vectores primitivos del espacio recíproco), el conjunto de parejas de vectores unitarios, la dimensionalidad del sistema, la longitud del sistema a lo largo de cada dimensión, el número total de puntos, la distancia entre voxels consecutivos a lo largo de diversas direcciones, las coordenadas de todos los voxels en la celda unitaria, las coordenadas de todos los vectores recíprocos, sus direcciones normalizadas, etc. Otro parámetro opcional es la dirección correspondiente al vector recíproco  $\mathbf{G} = 0$ , i.e.,  $\hat{\mathbf{k}}$ , requerido para los cálculos no retardados.

Con un objeto `Geometry` apropiadamente inicializado, uno puede crear un objeto `Haydock` que sabe calcular coeficientes de Haydock y es responsable de llevar a cabo las iteraciones correspondientes. Hay clases `Haydock` para cálculos basados en la proyección longitudinal de la permitividad  $\hat{\epsilon}^{LL}$  (`LE`), como las descritas en la sec. 3, y otras basadas en la ecuación de onda (`WE`), algunas para metamateriales binarios (2) con o sin retardamiento (**Retarded** `R2` o **Non Retarded** `NR2`) o para metamateriales multicomponentes empleando un formalismo tipo espínorial (`Spinor` para entradas escalares (`S`) o `Tensoriales` (`ST`) [15, 17]. Correspondientemente, hay diversos módulos como `Photonic::LE::NR2::Haydock`, `...::WE::R2::Haydock`, `...::LE::S::Haydock`, `...::LE::ST::Haydock`, `...::WE::S::Haydock`, `...::WE::ST::Haydock` que tienen un comportamiento similar pero son aplicables a diferentes sistemas bajo diferentes circunstancias. Su comportamiento común es capturado empleando roles. Por ejemplo, todas las clases recién mencionadas consumen el módulo `Photonic::Roles::Haydock` el cual contiene varios métodos compartidos.

Un ejemplo de un método compartido entre todas las clases `Haydock` es `iterate`, una subrutina que itera el procedimiento de Haydock, un fragmento del cual mostramos en la fig. 9. En la línea 5 se recupera el estado  $|n\rangle$ , en la línea 6 se aplica el operador relevante, digamos  $\hat{O}$  (como en la fig. 7, pasos 1-3). En la línea 7 se obtiene el coeficiente de Haydock  $a_n$  llevando a cabo un producto interior  $\langle n|\hat{O}|n\rangle$  entre  $|n\rangle$  y  $\hat{O}|n\rangle$  (fig. 7, paso 4). En las líneas 10 y 12 se obtiene el tamaño  $b_{n+1}$  del estado ortogonalizado (fig. 7, paso 5). Finalmente, en las líneas 14 y

```

1 sub applyOperator {
2     my $self=$shift;
3     my $psi_G=$shift;
4     my $GBGpsi_G=apply_longitudinal_projection($psi_G, $self->GNorm, $self->nDims, $self->B->r2C);
5     ...
6     return $GBGpsi_G;
7 }
```

Figura 10: Fragmento del método `applyOperator` definido en el módulo `Photonic::LE::NR2::Haydock`.

```

1 sub apply_longitudinal_projection {
2     my ($psi_G, $gnorm, $ndims, $coeff) = @_;
3     ...
4     my $Gpsi_G=$psi_G->dummy(0)*$gnorm;
5     my $Gpsi_R=GtoR($Gpsi_G, $ndims, 1);
6     my $eGpsi_R=$coeff->dummy(0)*$Gpsi_R;
7     my $eGpsi_G=RtoG($eGpsi_R, $ndims, 1);
8     ($eGpsi_G*$gnorm)->sumover;
9 }
```

Figura 11: Fragmento de la función de utilería `apply_longitudinal_projection`.

15 producimos el nuevo estado ortonormalizado  $|n + 1\rangle$  (fig. 7, paso 6), a menos que  $b_{n+1}$  sea tan pequeño que el procedimiento de Haydock pueda considerarse convergido y terminado.

El procedimiento de Haydock capturado por el rol `Haydock` role e ilustrado en la fig. 9 es el mismo para todas las clases `Haydock` mencionadas arriba, pero cada clase debe proveer su propio *operator* y su *producto interno*. Por ejemplo, el código del módulo `Photonic::LE::NR2::Haydock` contiene el método `applyOperator` mostrado en la fig. 10. En la línea 3 se obtiene el estado actual y en la línea 4 se llama a la función de utilería `apply_longitudinal_projection`, definida, junto con muchas otras funciones comunes en el módulo `Photonic::Utils`. Los argumentos que se pasan a esta función son `$psi_G`, la representación del estado actual en espacio recíproco,  $\psi_n(\mathbf{G})$ , `$self->GNorm`, los vectores de la red recíproca normalizada  $\{\hat{\mathbf{G}}\}$ , `$self->nDims`, la dimensionalidad del sistema y `$self->B->r2C`, la función característica  $B(\mathbf{r})$  evaluada en los puntos  $\mathbf{r}$  dentro de la celda unitaria convertidos a números complejos. El código de esta función de utilería se muestra en la fig. 11. En la línea 2 se obtienen todos los argumentos descritos arriba. En la línea 4 se multiplica la función de onda  $\psi_n(\mathbf{G})$  por los vectores recíprocos normalizados  $\rightarrow \psi_n(\mathbf{G}) = \hat{\mathbf{G}}\psi_n(\mathbf{G})$  (fig. 7 paso 1). En la línea 5 se aplica una transformada de Fourier transform del campo vectorial resultante hacia el espacio real  $\rightarrow \psi_n(\mathbf{r})$  (fig. 8, paso 2a). La función de utilería `GtoR` usa el módulo `PDL::FFTW3` para llevar a cabo una transformada de Fourier rápido sobre todas las dimensiones, excepto la dimensión del campo vectorial (correspondiente al argumento 1 al final de la lista). La misma subrutina puede emplearse para transformar campos escalares campos tensoriales cambiando simplemente el último argumento. En la línea 6 se multiplica el campo vectorial en espacio real por la función característica  $\rightarrow \phi_{n+1}(\mathbf{r}) = B(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r})$  (fig. 8, paso 2b). En la línea 7 se transforma el campo vectorial resultante de regreso al espacio recíproco  $\rightarrow \phi_{n+1}(\mathbf{G})$  (fig. 8, paso 2c). Finalmente, en la línea 8 tomamos el producto escalar con los vectores recíprocos normalizados  $\rightarrow \phi_{n+1}(\mathbf{G}) = \hat{\mathbf{G}} \cdot \phi_{n+1}(\mathbf{G})$  (fig. 7, paso 3). Se puede notar que hay una fuerte correspondencia entre los procedimientos descritos en las figs. 7 y 8 con el código listado en las figs. 9, 10 y 11, aunque el código de la fig. 9 es más general y puede emplearse sin modificación para los casos multicomponentes y para los casos retardados, así como para los casos anisotrópicos.

## 5. Ejemplos

En esta sección presentamos como ilustración algunos ejemplos de códigos que emplean la distribución `Photonic` para calcular la respuesta macroscópica de sistemas simples.

```

1 use v5.36;
2 use PDL;
3 my $N_sml=21;
4 say my $b_small=zeroses($N_sml,$N_sml)->rvals<.35*$N_sml; # Square lattice of cylinders

```

Figura 12: Fragmento de código para construir la función característica de un pequeño sistema 2D, una red cuadrada de partículas circulares, o una red cuadrada de cilindros paralelos con simetría translacional a lo largo de la tercera dimensión.

```

[ [0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0]
[0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 0]
]
```

Figura 13: Función característica impresa por el fragmento de código de la fig. 12.

### 5.1. Construye y despliega una función característica pequeña

El primer paso para el uso de *Photonic* es el diseño del sistema. En el caso de un metamaterial binario podremos caracterizar su geometría a través de la función característica  $B : \mathbf{r} \rightarrow B(\mathbf{r})$ , una función que mapea cada posición  $\mathbf{r}$  a un número  $B(\mathbf{r})$ , ya sea un 1 o un 0. En *Photonic* el espacio se discretiza y se representa por un arreglo `nd` de voxels (elementos de volumen en 3D) o pixeles (elementos de imagen (*picture elements*) en 2D o en 1D). Luego, la función característica para un problema  $D$ -dimensional se representa por un arreglo `nd`. El tamaño de sus  $D$  dimensiones es el número de elementos a lo largo de cada dirección independiente. El código en la fig. 12 usa el lenguaje *Perl Data Language* (PDL) para inicializar un pequeño arreglo 2D con los valores 1 o 0, dependiendo de si la distancia al centro del arreglo es mayor o menor que un radio dado. En la línea 4 se construye un arreglo de  $21 \times 21$  pixeles lleno de ceros (`zeroes`), luego se calcula la distancia euclídea de cada punto al centro del arreglo (`rvals`) y se compara con un radio dado, elegido como 35 % del parámetro de red. El resultado es un arreglo lleno de unos y ceros, como muestra la fig. 13.

Podemos apreciar que los unos ocupan las posiciones de un círculo burdo de baja resolución.

PDL tiene otros métodos además de `rvals` que pueden ser empleados para construir figuras más ricas que el simple círculo mostrado arriba, tales como `xvals` (las coordenadas x de cada elemento), `yvals` (las coordenadas y), `zvals` (las coordenadas z) y `ndcoords` (un vector con todas las coordenadas de cada elemento). El lado derecho en

```

1 use PDL::Constants qw(PI);
2 my $r_sml=zeroes($N_sml,$N_sml)->rvals;
3 my $theta_sml=atan2($r_sml->xvals-10, $r_sml->yvals-10);
4 say my $b_tri=$r_sml<(.3+.15*cos(4*$theta_sml+PI))*$N_sml;

```

Figura 14: Fragmento de código que produce una cruz.

```

[ [0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0] [0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0] [0 0 0 1 1 1 1 0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 1 1 1 1 1 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 1 1 1 1 1 1 0 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0] [0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0] ]
]
```

Figura 15: Función característica impresa por el fragmento de código mostrado en la fig. 14.

la línea 4 podría reemplazarse por  $\dots \$b=F(\text{zeroes}(\$Nx, \$Ny, \$Nz)->\text{ndcoords}) < 1$ ; para alguna función  $F$  tal que la ecuación  $F(\mathbf{r}) = 1$  defina la superficie de las partículas y  $F(\mathbf{r}) < 1$  su interior. Por ejemplo, en la fig. 14 mostramos un fragmento de código que produce una función característica correspondiente a un objeto en forma de cruz. En la línea 3 se calculan las coordenadas angulares a partir de las coordenadas cartesianas y la línea 4 las usa para calcular para cada punto si está afuera o adentro de la cruz. La cruz resultante puede apreciarse con baja resolución en la fig. 15. Podemos construir funciones características más complejas transformando figuras simples, por ejemplo mediante el módulo `PDL::Transform`, y calculando la unión o intersección de varias figuras usando para ello los operadores disyunción y conjunción orientados a bits `|` y `&`.

## 5.2. Construye una función característica mayor

La fig. 16 muestra el código para construir y desplegar una función característica mayor y con mejor resolución. La línea 1 carga el módulo `PDL::Graphics::Gnuplot` para graficar los resultados subsecuentes. La línea 2 define la longitud (201 pixeles por lado) de la nueva función característica  $B(\mathbf{r})$ . La línea 3 define el radio de la inclusión como el 20 % del parámetro de red. La línea 4 construye la función característica `$b` en analogía con la línea 4 de la fig. 12 y finalmente, las líneas 5 y 6 producen una imagen `png` de la función característica. El resultado se muestra en la fig. 17. La naturaleza pixelada de nuestra representación es visible como una rugosidad escalonada en la frontera del círculo resultante.

```

1 use PDL::Graphics::Gnuplot;
2 my $N=201;
3 my $R=0.2;
4 my $b=zeroses($N,$N)->rvals<$R*$N;
5 gplot({term=>'pngcairo', output=>'b.png', justify=>1, colorbox=>0, xtics=>0, ytics=>0},
6       with=>'image', $b);

```

Figura 16: Fragmento de código para construir y desplegar una función característica mayor.

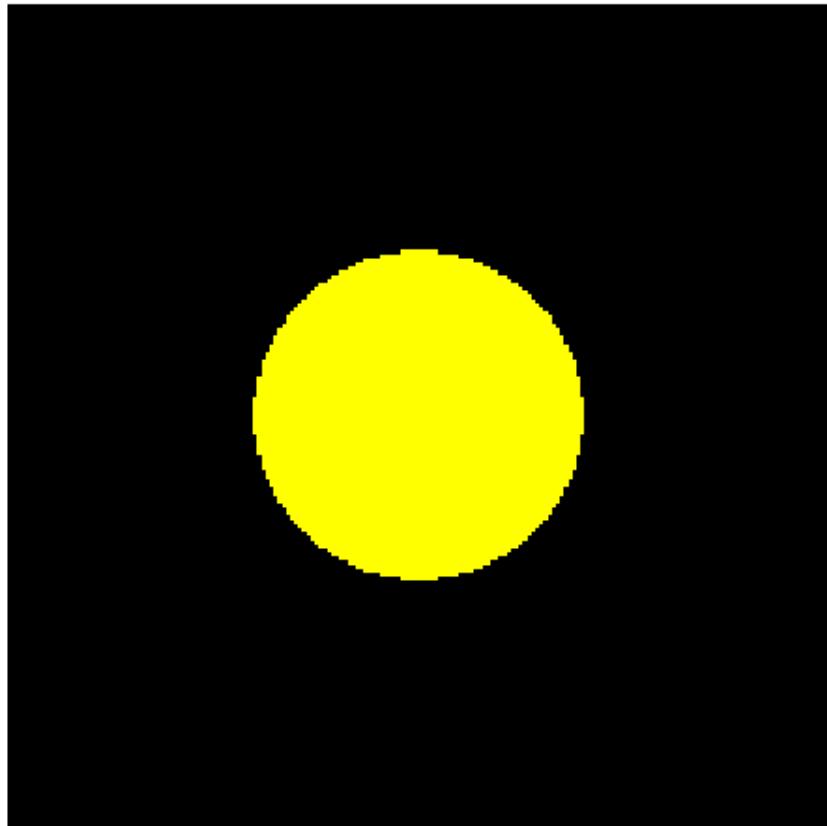


Figura 17: Función característica  $B(\mathbf{r})$  correspondiente a una imagen 2D de  $201 \times 201$  pixeles. Los puntos amarillos corresponden a  $B(\mathbf{r}) = 1$  y los puntos negros a  $B(\mathbf{r}) = 0$ . EL radio es 20 % del parámetro de red.

```

1 use Photonic::Utils qw(tile);
2 gplot({term=>'pngcairo', output=>'repeated_b.png', justify=>1, colorbox=>0, xtics=>0, ytics=>0},
3      with=>'image', tile($b,5,5));

```

Figura 18: Fragmento de código para visualizar un cristal producido por el teselado del espacio 2D con copias de la celda unitaria desplegada en la fig. 17.

### 5.3. Despliega la red

La fig. 17 muestra una celda de un metamaterial periódico. Para una mejor visualización, es conveniente desplegar el cristal artificial obtenido mediante la repetición periódica de la celda unitaria. Con dicho propósito, teselamos algunas copias de la celda unitaria con el código mostrado en la fig. 18. En la línea 1 cargamos la subrutina `tile` del paquete de utilerías `Photonic::Utils`, y la usamos para construir una imagen con  $5 \times 5$  copias de la celda unitaria. El resultado se muestra en la fig. 19.

### 5.4. Inicializa un objeto que encapsule la geometría

En la fig. 20 mostramos un fragmento de código que emplea la función característica construida arriba para inicializar un objeto que encapsule la geometría (`Geometry`). En la línea 1 cargamos un módulo que establece la geometría a partir de una función característica. Otras alternativas podrían ser inicializar la geometría a partir de, una imagen en blanco y negro pixelada, de una respuesta dieléctrica microscópica o de un tensor dieléctrico. La geometría es inicializada en la línea 4. Además de la función característica `B`, también podemos inicializar la dirección de propagación del campo macroscópico `Direction0` y los parámetros de red a lo largo de las direcciones cartesianas `L`, definidos en las líneas 2 y 3.

### 5.5. Explora algunos atributos geométricos

Podemos usar el objeto `geometría` para hallar algunas propiedades geométricas del sistema, como ilustra la fig. 21. El método `f` regresa la fracción de llenado de las partículas. El método `G` produce la red recíproca, un arreglo `nd`, cuyo método `info` produce una información útil. En la línea 5 calculamos el valor absoluto de estos vectores recíprocos, los escalamos y seleccionamos una pequeña rebanada del arreglo resultante para imprimirla. En la línea 7 hacemos lo mismo para las direcciones normalizadas de los vectores recíprocos. Los resultados se muestran en la fig. 22. Los resultados de la fig. 22 muestran que

- La fracción de llenado es aproximadamente  $1/8$  (línea 1). La fracción de llenado esperada es el área de los círculos, cuyo radio fue elegido como  $20\%$  del parámetro de red, dividida entre el área de la celda unitaria, i.e.,  $\pi \times 0,2^2 = 0,1256637\dots$ . La pequeña discrepancia en la quinta cifra se debe a la naturaleza pixelada de la función característica empleada en el cálculo numérico vs. la función analítica.
- La red recíproca es un arreglo de  $2 \times 201 \times 201$  dimensiones con números de doble precisión (línea 2), i.e., un vector 2D para cada uno de los  $201 \times 201$  vectores posibles, pues tenemos  $201 \times 201$  posiciones discretas en la celda unitaria.
- Como elegimos una red cuadrada, el tamaño de los vectores recíprocos normalizados crece por pasos enteros a lo largo de los ejes  $x$  (horizontal) y  $y$  (vertical), mientras que crece por múltiplos de  $\sqrt{2}$  a lo largo de la diagonal principal (líneas 3–9). El origen de la red recíproca corresponde a la esquina superior izquierda del arreglo `nd`, no a su centro, el cual a su vez corresponde al vector recíproco máximo. Después del centro, los vectores recíprocos cambian dirección. Este orden es dictado por la convención de las rutinas que toman la transformada rápida de Fourier.
- Todos los vectores recíprocos normalizados tienen magnitud 1 (líneas 11–17), aún el vector  $\mathbf{G} = (0, 0)$  en la orilla superior izquierda, como discutimos tras la ec. 19.

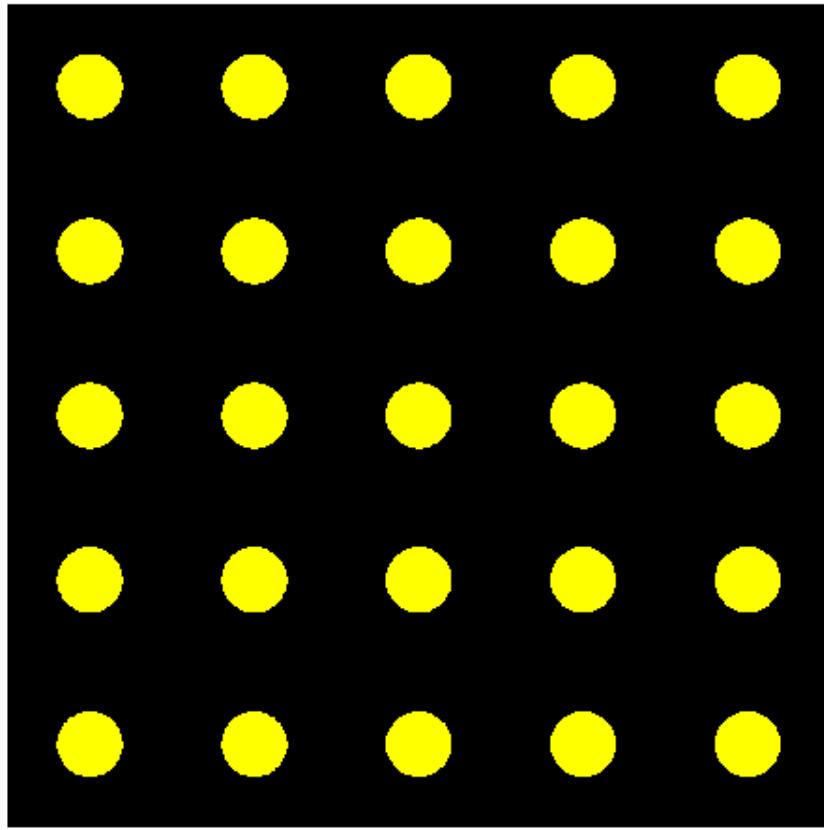


Figura 19: Parte de una red periódica cuadrada de cilindros obtenidos del teselado de la celda unitaria mostrada por la fig. 17.

```

1 use Photonic::Geometry::FromB;
2 my $k=pdl(1,0); # wavevector along x
3 my $L=1; # lattice parameter
4 my $g=Photonic::Geometry::FromB->new(B=>$b, Direction0=>$k, L=>pdl($L,$L));

```

Figura 20: Fragmento de código que inicializa un objeto `Geometry` a partir de una función característica.

```

1 say "Filling fraction: ", $g->f;
2 say "Reciprocal lattice info: ", $g->G->info;
3 use PDL::Constants qw(PI);
4 say "Scaled reciprocal lattice, some magnitudes: ",
5 $g->G->abs2->sumover->sqrt->slice("0:3,0:3")*$L/(2*PI); # scaled to Brillouin cell's size
6 say "Normalized reciprocal lattice, sample of magnitudes:",
7 $g->GNorm->abs2->sumover->sqrt->slice("0:3,0:3");

```

Figura 21: Código para explorar algunas propiedades geométricas del sistema.

```

1 Filling fraction: 0.125566198856464
2 Reciprocal lattice info: PDL: Double D [2,201,201]
3 Scaled reciprocal lattice, some magnitudes:
4 [
5   [ 0           1           2           3]
6   [ 1 1.4142136 2.236068 3.1622777]
7   [ 2 2.236068 2.8284271 3.6055513]
8   [ 3 3.1622777 3.6055513 4.2426407]
9 ]
10
11 Normalized reciprocal lattice, sample of magnitudes:
12 [
13   [1 1 1 1]
14   [1 1 1 1]
15   [1 1 1 1]
16   [1 1 1 1]
17 ]

```

Figura 22: Resultados de correr el código mostrado en la fig. 21.

```

1 use Photonic::LE::NR2::Haydock;
2 my $Nh=$N; # desired number of Haydock coefficients
3 my $h=Photonic::LE::NR2::Haydock->new(geometry=>$g, nh=>$Nh);

```

Figura 23: Fragmento de código para inicializar un calculador de Haydock empleando un objeto tipo Geometry.

## 5.6. Inicializa un calculador de coeficientes de Haydock

La fig. 23 ilustra cómo podemos inicializar un objeto `Haydock`, un calculador de coeficientes de Haydock, empleando un objeto que representa una geometría. La línea 1 carga un módulo que calcula los coeficientes de Haydock empleando el procedimiento descrito en la sec. 3, i.e. basado en la respuesta dieléctrica longitudinal  $\epsilon^{LL}$  (LE) en el régimen no retardado para metamateriales binarios (NR2). La línea 2 define el número máximo deseado de coeficientes a calcular. Un número razonable suele ser el número de voxels a lo largo de un lado de la celda unitaria, aunque es buena práctica checar convergencia de los resultados conforme este parámetro es incrementado. Finalmente, la línea 3 inicializa el calculador de Haydock con la geometría previamente definida.

## 5.7. Cálculo de la permitividad

La fig. 24 muestra un fragmento de código que emplea el calculador de Haydock definido arriba para inicializar un calculador de la función dieléctrica, el cual emplea para obtener la permitividad de una red de varillas cilíndricas de vidrio. La línea 1 carga un módulo para el cálculo de la proyección longitudinal de la respuesta dieléctrica de metamateriales binarios en el régimen no retardado, empleando la ec. (23). Las líneas 2-3 crean el calculador dieléctrico empleando el calculador de Haydock de la fig. 23, el número máximo de coeficientes de Haydock a emplear,

```

1 use Photonic::LE::NR2::EpsL;
2 my $eps=Photonic::LE::NR2::EpsL->new(
3   haydock=>$h, nh=>$Nh, epsA=>1+0*i(), epsB=>2+0*i());
4 say sprintf "Square lattice of glass rods, epsilon=% .2f", $eps->epsL->re;

```

Figura 24: Fragmento de código para calcular la permitividad macroscópica de una red cuadrada de cilindros de vidrio.

Figura 25: Resultado de correr el código de la fig. 24.

```

1 my $w=zeroses(200)->xlinvals(.1,1.2);
2 my $tau=50;
3 my $drude=1-1/($w*($w+i($tau)));
4 gplot({term=>'pngcairo', output=>'drude.png',
5       title=>"Drude dielectric function",
6       xlabel=>"Frequency {Symbol w/w} - p",
7       ylabel=>"Dielectric function {Symbol e}",
8       yrange=>[-10,2]}, with=>'lines', $w, $drude->re);

```

Figura 26: Código para calcular y mostrar la respuesta dieléctrica obtenida mediante el modelo de Drude para metales.

que podría ser igual o menor que el empleado en la fig. 23, la función dieléctrica  $\epsilon_A = 1$  del medio anfitrón, el cual tomamos como espacio vacío, y la respuesta dieléctrica  $\epsilon_B = 2$  de las inclusiones, a la cual dimos un valor cercano al del vidrio ordinario. En la línea 4 se calcula e imprime el resultado mostrado en la fig. 25. El resultado  $\epsilon_M = 1,09$  es alrededor de 1 % arriba de la permitividad del vacío debido a la pequeña fracción de llenado de las varillas de vidrio, como fue discutido alrededor de la fig. 22. Este resultado es consistente con el que arroja la teoría clásica de Maxwell-Garnett en dos dimensiones [6],

$$\frac{\epsilon_M - \epsilon_A}{\epsilon_M + \epsilon_A} = f \frac{\epsilon_B - \epsilon_A}{\epsilon_B + \epsilon_A}, \quad \epsilon_M = \epsilon_A \frac{(\epsilon_B + \epsilon_A) + f(\epsilon_B - \epsilon_A)}{(\epsilon_B + \epsilon_A) - f(\epsilon_B - \epsilon_A)}. \quad (24)$$

## 5.8. Respuesta metálica

Aunque el resultado obtenido en la sección anterior es correcto, obtener un número consistente con una teoría de hace un siglo podría no parecer demasiado interesante. Por ello, en lo que sigue ilustramos cómo calcular espectros completos para metamateriales. Para ello, elegimos una red de alambres conductores cilíndricos. Para modelar su conductividad empleamos la teoría de Drude [3], de acuerdo a la cual la permitividad de un metal formado por electrones libres e independientes está dada por

$$\epsilon_D(\omega) = 1 - \omega_p^2 / (\omega^2 + i\omega/\tau), \quad (25)$$

donde  $\omega_p$  es la *frecuencia de plasma* del metal, una cantidad relacionada con su densidad electrónica y que típicamente corresponde a la región ultravioleta del espectro electromagnético, y donde  $\tau$  puede intrepretarse como el tiempo promedio entre colisiones de electrones de conducción con impurezas o con fonones, vibraciones cuantizadas de los átomos. En la fig. 26 mostramos un fragmento de código para obtener la respuesta de Drude. En la línea 1 preparamos un arreglo de frecuencias que va desde  $\omega_p/10$  hasta un poco arriba de  $\omega_p$ , y la normalizamos a  $\omega_p$ . En la línea 2 escogemos un valor típico para la vida media  $\omega_p\tau = 50$ . En la línea 3 creamos un arreglo con los valores correspondientes de la permitividad de Drude empleando la ec. (25), un valor complejo para cada frecuencia. Finalmente, en las líneas 4-8 graficamos la parte real de  $\epsilon_D$  vs.  $\omega$ , fig. 27. Notamos que la permitividad del metal es negativa para frecuencias bajas y que cambia de signo en la frecuencia de plasma.

## 5.9. Espectro para una red cuadrada de alambres metálicos cilíndricos

En la fig. 28 mostramos un fragmento de código para calcular la permitividad macroscópica  $\epsilon_M(\omega)$  de una red cuadrada de alambres cilíndricos caracterizados por una permitividad de Drude. En las líneas 1-6 inicializamos un calculador de funciones dieléctricas como en la fig. 24, empleando el mismo calculador de Haydock, pero empleando distintos valores de la permitividad de Drude, una para cada frecuencia. Luego, evaluamos la respuesta macroscópica y la incorporamos a un arreglo `$eps_wire` para ser graficada en las líneas 9-14. También graficamos los resultados de la teoría aproximada de Maxwell-Garnett dada por la ec. (24) y calculada en la línea 7. Los resultados se muestran

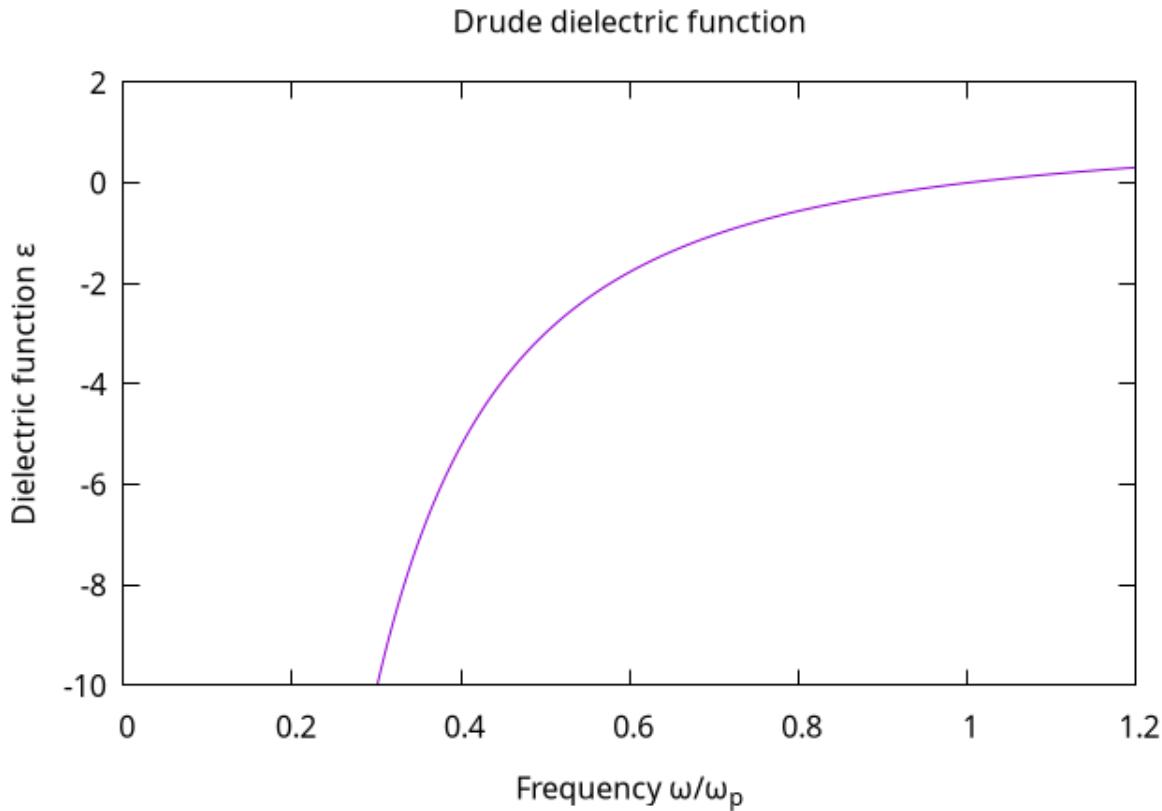


Figura 27: Parte real de la permitividad de Drude  $\epsilon_D(\omega)$  vs. la frecuencia normalizada  $\omega/\omega_p$ .

```

1 my $eps_wire=pdl(
2 map {Photonic::LE::NR2::EpsL->new(
3     haydock=>$h, nh=>$Nh, epsA=>1+0*i(), epsB=>$_
4     )->epsL
5 } $drude->dog
6 );
7 my $eps_approx=($drude+1+$g->f*($drude-1))/($drude+1-$g->f*($drude-1));
8 gplot({term=>'pngcairo', output=>'square.png',
9 title=>sprintf("%s f=% .2f",
10 "Im macroscopic dielectric function, square",@{[$g->f]}),
11 xlabel=>"Frequency {Symbol w/w}_P",
12 ylabel=>"Macroscopic permittivity {Symbol e}_M",
13 {with=>'lines', legend=>"Num.", $w, $eps_wire->im,
14 {with=>'lines', legend=>"MG"}, $w, $eps_approx->im};
```

Figura 28: Código para calcular y graficar la permitividad macroscópica  $\epsilon_M$  de una red cuadrada de alambres cilíndricos conductores tipo Drude como función de la frecuencia normalizada  $\omega/\omega_P$  para la misma geometría que en la fig. 19.

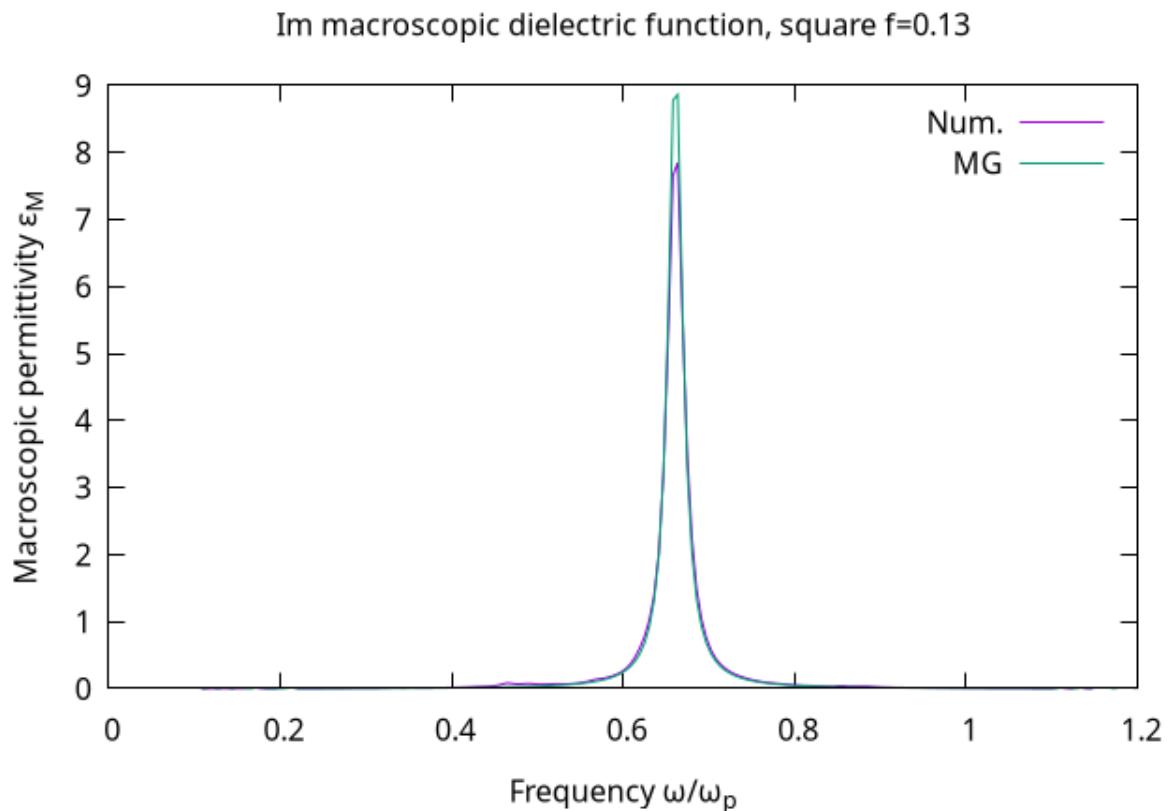


Figura 29: Parte imaginaria de la permitividad macroscópica  $\epsilon_M$  de una red cuadrada de alambres de drude con una geometría correspondiente a la fig. 19. Se muestran los resultados de un cálculo numérico (Num.) empleando el formalismo de Haydock y los de un cálculo analítico empleando la teoría de Maxwell-Garnett (MG).

```

1 my $R_fat=.45;
2 my $b_fat=zeroes($N,$N)->rvals<$R_fat*$N;
3 my $g_fat=Photonic::Geometry::FromB->new(
4 B=>$b_fat, Direction0=>$k, L=>pdl($L,$L));
5 my $h_fat=Photonic::LE::NR2::Haydock->new(
6 geometry=>$g_fat, nh=>$Nh);
7 my $eps_fat=pdl(
8 map {Photonic::LE::NR2::EpsL->new(
9 haydock=>$h_fat, nh=>$Nh, epsA=>1+0*i(), epsB=>$_)->epsL}
10 $drude->dog
11 );
12 my $eps_MG_fat=($drude+1+$g_fat->f*($drude-1))/($drude+1-$g_fat->f*($drude-1));
13 my $tiled_fat=tile($b_fat,5,5);
14 gplot({term=>'pngcairo', output=>'repeated_fat.png', justify=>1, colorbox=>0, xtics=>0, ytics=>0},
15 with=>'image', $tiled_fat);
16 gplot({term=>'pngcairo', output=>'fat.png',
17 title=>sprintf("%s, f=%.2f",
18 "Macroscopic dielectric function",@{[$g_fat->f]}),
19 xlabel=>"Frequency {/Symbol w/w}_P",
20 ylabel=>"Macroscopic permittivity {/Symbol e}_M",
21 yrange=>[0,30],
22 {with=>'lines', legend=>"Num."}, $w, $eps_fat->im,
23 {with=>'lines', legend=>"MG"}, $w, $eps_MG_fat->im);

```

Figura 30: Código para calcular la respuesta dieléctrica macroscópica de una red cuadrada de alambres conductores de Drude cilíndricos. El radio escogido corresponde a 45 % del parámetro de red.

en la fig. 29. Hallamos que hay una resonancia correspondiente al plasmón dipolar localizado de un cilindro metálico, corrido ligeramente al rojo por su interacción con los alambres vecinos. El cálculo numérico está en excelente acuerdo con la teoría de Maxwell-Garnett, como podría esperarse debido a la baja fracción de llenado empleada.

## 5.10. Alambres gruesos

En la fig. 30 mostramos un código para el cálculo de la permitividad macroscópica de una red cuadrada de alambres relativamente gruesos. El código es análogo al mostrado en las figs. 16, 18, 20, 21, 23, y 28, pero empleando un radio mayor  $\$R_fat=0.45$ . La geometría del sistema se ilustra en la fig. 31. El espectro de la permitividad macroscópica se muestra en la fig. 32. Notamos que como los alambres se hallan más cerca uno del otro, sus interacciones mutuas son mayores que las de alambres delgados y por ello el pico mayor de la permitividad se halla aún más corrido hacia el rojo. Sin embargo, el corrimiento es más grande según el cálculo numérico que el predicho por la fórmula analítica de la teoría de Maxwell-Garnett. Además, los resultados numéricos muestran una serie adicional de picos visibles más a la derecha, los cuales están ausentes en el resultado de la teoría de MG. Éstos corresponden a plasmones multipolares localizados inducidos por la cercanía entre partículas vecinas y por las inhomogeneidades de los campos cercanos que producen.

## 5.11. Red rectangular

La fig. 33 muestra un código para calcular el espectro de la permitividad macroscópica de una red rectangular obtenida estirando en la dirección vertical la red cuadrada discutida arriba. Este código tiene pequeñas diferencias con respecto al mostrado en la fig. 30. En la línea 2, los parámetros de red se inicializan con un vector  $L=>pdl($L, 2*\$L)$ , lo cual significa que el parámetro de red es el doble de largo en la dirección  $y$  que en la dirección  $x$ . Como ambos códigos usan la misma función característica, el número de pixeles a lo largo de  $y$  es igual que a lo largo de  $x$ . Este cálculo emplea pixeles rectangulares, no cuadrados, aunque un cálculo similar podría hacerse con pixeles cuadrados duplicando su número a lo largo de  $y$ . El otro cambio es que en lugar de una geometría, un calculador de Haydock y un calculador de permitividades macroscópicas, inicializamos y ejecutamos arreglos de cada uno, con un elemento para cada dirección cartesiana. Para ello, el operador `map` de Perl es ideal. El sistema resultante se muestra en la fig. 34. La permitividad correspondiente se muestra en la fig. 35. En este caso, la resonancia dipolar parece no alterarse, pero las resonancias multipolares se dividen en parejas, una de las cuales se corre a la izquierda

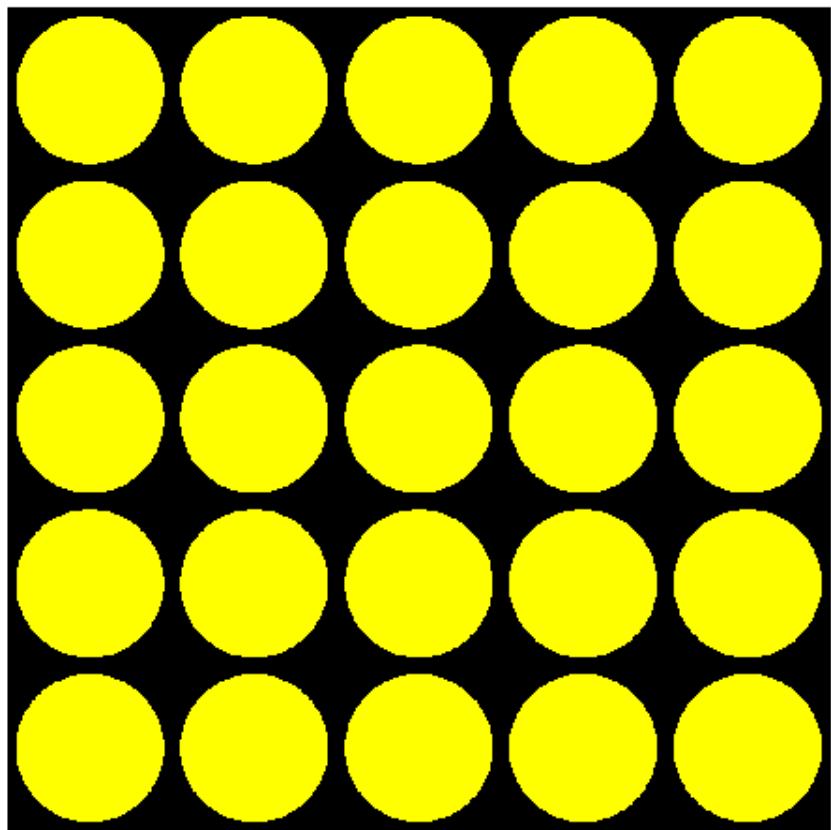


Figura 31: Red cuadrada de cilindros conductores de Drude. Su radio es 45 % del parámetro de red.

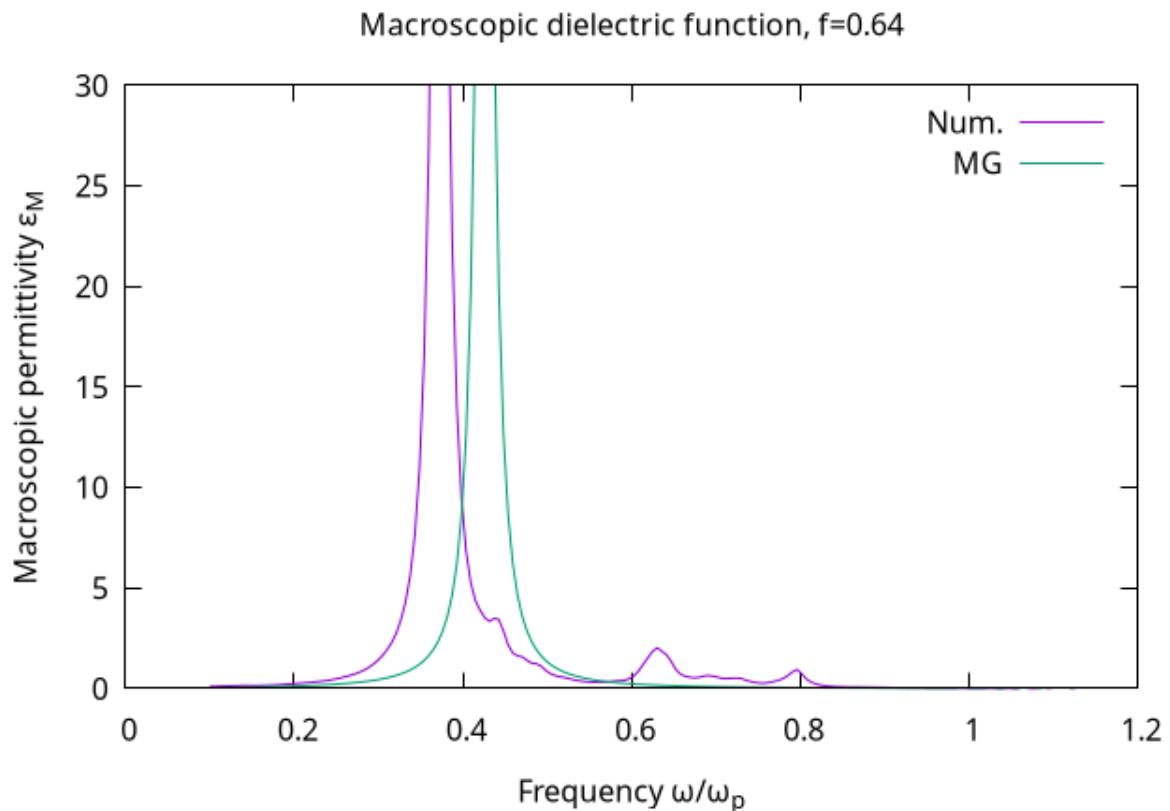


Figura 32: Parte imaginaria de la permitividad de la red cuadrada de alambres conductores de Drude mostrada en la fig. 31. Se muestran resultados de un cálculo numérico (Num.) empleando el formalismo de Haydock y de la teoría analítica de Maxwell-Garnett (MG).

```

1 my @g_long= map {Photonic::Geometry::FromB->new(
2   B=>$b_fat, Direction0=>$_, L=>pdl($L,2*$L))} ($k, $k->rotate(1));
3 my @h_long=map {Photonic::LE::NR2::Haydock->new(
4   geometry=>$_, nh=>$Nh)} @g_long;
5 my @eps_long=map {
6   my $h=$_;
7   pdl(map {
8     Photonic::LE::NR2::EpsL->new(
9       haydock=>$h, nh=>$Nh, epsA=>1+0*i(), epsB=>$_)->epsL
10      }$drude->dog
11    )
12  } @h_long;
13 gplot({term=>'pngcairo', output=>'repeated_rectangular.png', justify=>1, colorbox=>0, xtics=>0, ytics=>0},
14   with=>'image', $tiled_fat->xvals, 2*$tiled_fat->yvals, $tiled_fat);
15 gplot({term=>'pngcairo', output=>'rectangular.png',
16   title=>sprintf("%s, f=%2f",
17     "Macroscopic dielectric function, rectangular",
18     @{$[g_long[0]->f]}),
19   xlabel=>"Frequency /Symbol w/w_P",
20   ylabel=>"Macroscopic permittivity /Symbol e_M",
21   yrange=>[0,30],
22   {with=>'lines', legend=>"Square"}, $w, $eps_fat->im,
23   {with=>'lines', legend=>"Rectangle xx"}, $w, $eps_long[0]->im,
24   {with=>'lines', legend=>"Rectangle yy"}, $w, $eps_long[1]->im);

```

Figura 33: Código para calcular la permitividad macroscópica no retardada proyectada sobre las direcciones  $x$  y  $y$ ,  $\epsilon_M^{xx}$  y  $\epsilon_M^{yy}$ , de un metamaterial formado por una red rectangular. El sistema corresponde al ilustrado en la fig. 31 pero estirado a lo largo de la dirección vertical  $y$ .

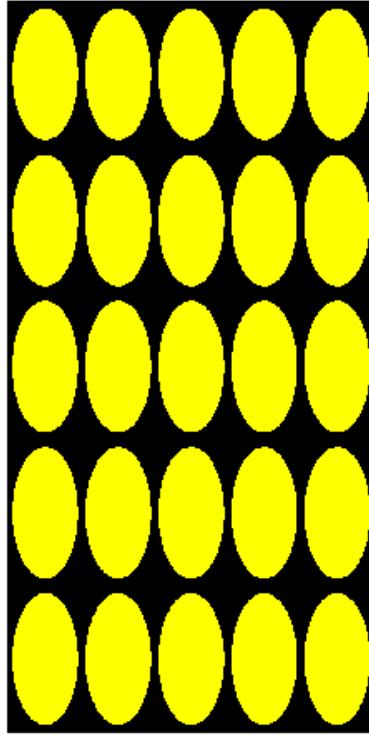


Figura 34: Red rectangular de alambres metálicos de Drude con sección transversal elíptica obtenida estirando la red de la fig. 31 a lo largo de la dirección  $y$ .

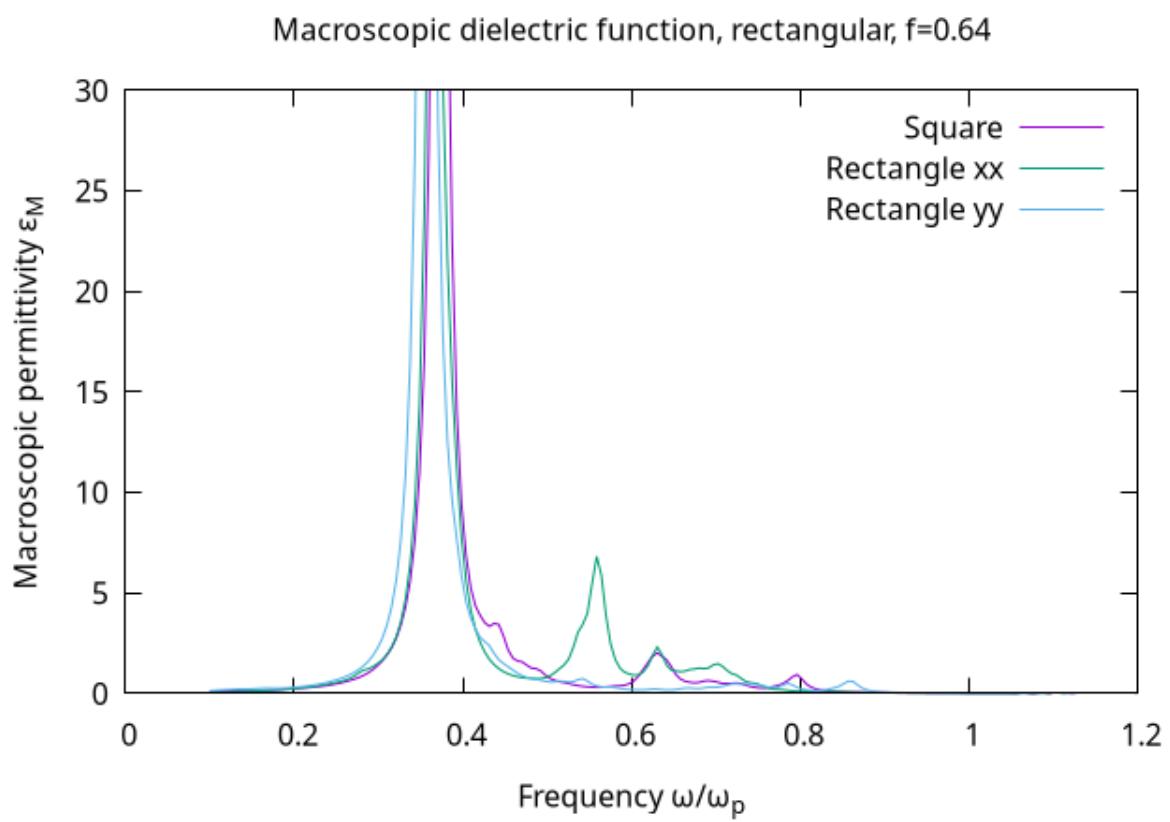


Figura 35: Parte imaginaria de las componentes principales  $\epsilon_M^{xx}$  y  $\epsilon_M^{yy}$  de la permitividad macroscópica de la red mostrada en la fig. 34. El resultado correspondiente para la red cuadrada se muestra para comparación.

```

1 use Photonic::LE::NR2::EpsTensor;
2 my $shear=0.5;
3 my $g_sheared=Photonic::Geometry::FromB->new(
4     B=>$b_fat, L=>pdl($L,2*$L),
5     primitive=>pdl([[1,0],[shear,1]]));
6 my $h_sheared=Photonic::LE::NR2::EpsTensor->new( # initialize array of Haydock's once
7     geometry=>$g_sheared, nh=>$Nh, epsA=>1+0*i(), epsB=>1+0*i())->haydock;
8 my $eps_sheared=pdl(
9     map {Photonic::LE::NR2::EpsTensor->new(
10         geometry=>$g_sheared, haydock=>$h_sheared, nh=>$Nh,
11         epsA=>1+0*i(), epsB=>$_)->epsTensor}
12     $drude->dog
13 );
14 gplot({term=>'pngcairo', output=>'sheared.png',
15     title=>sprintf("%s, f=% .2f shear=% .2f",
16                     "Macroscopic dielectric function, sheared",
17                     @{$[$g_sheared->f]}, $shear),
18     xlabel=>"Frequency {/Symbol w/w}_p",
19     ylabel=>"Macroscopic permittivity {/Symbol e}_M",
20     yrange=>[-10,30],
21     {with=>'lines', legend=>"Sheared xx"}, $w, $eps_sheared->slice("(0),(0)")->im,
22     {with=>'lines', legend=>"Sheared xy"}, $w, $eps_sheared->slice("(1),(0)")->im,
23     {with=>'lines', legend=>"Sheared yy"}, $w, $eps_sheared->slice("(1),(1)")->im,
24     {with=>'lines', legend=>"Square"}, $w, $eps_fat->im};

```

Figura 36: Código para calcular la permitividad macroscópica no retardada de un metamaterial con una red oblicua de alambres de Drude obtenida mediante una deformación de cizalla a lo largo de la dirección  $x$  de la red mostrada en la fig. 34.

mientras que la otra conserva su posición. Además, el resultado es anisotrópico, con respuesta distinta a lo largo de la dirección  $x$  que a lo largo de la dirección  $y$ .

## 5.12. Estructura oblicua

Como un ejemplo final, en la fig. 36 mostramos un código para el calcuo de la respuesta de una red oblicua, obtenida de aquella en la fig. 34 mediante una deformación de cizalla a lo largo de la dirección  $x$ . En este caso, la respuesta macroscópica es anisotrópica y la geometría del sistema no permite adivinar las direcciones de los ejes principales, a diferencia de los ejemplos previos que eran o bien isotrópicos o tenían ejes principales a lo largo de las direcciones cartesianas. Por tanto, para hallar todas las componentes de la respuesta tensorial, se deben calcular las respuestas proyectadas para distintas elecciones de la dirección longitudinal  $\hat{k}$ . En el caso 2D bastaría considerar proyecciones a lo largo de  $(1, 0)$ ,  $(0, 1)$  y  $(1, 1)$ . Sin embargo, en 3D requeriríamos un conjunto mayor de proyecciones, y un conjunto aún mayor para sistemas con actividad óptica. El módulo `Photonic::LE::NR2::EpsTensor`, cargado en la línea 1, tiene el código para elegir las proyecciones requeridas, inicializar una geometría (`Geometry`) para cada una de ellas, construyéndolas sobre la geometría provista más genérica, sin el atributo `Direction0` que define la dirección longitudinal, y que se construye en las líneas 3-5 arriba, en donde empleamos el atributo `primitive` para proveer a la geometría de los vectores primitivos no cartesianos de la estructura deformada, i.e., con el fragmento `primitive=>pdl([[1,0],[shear,1]])` en la línea 5. El módulo `EpsTensor` construye el arreglo requerido de calculadores de Haydock, uno para cada geometría `Geometry`. En las líneas 6-7 construimos un objeto `EpsTensor` para extraer su arreglo de calculadores de Haydock. En las líneas 8-13 reciclamos estos calculadores conforme construimos muchos objetos del tipo `EpsTensor`, uno para cada frecuencia, evaluamos la permitividad tensorial correspondiente y la guardamos en el arreglo nd `$eps_sheared`. Finalmente, en las líneas 14-24 graficamos sus tres componentes independientes.

La red resultante se muestra en la fig. 37. La permitividad correspondiente se muestra en la fig. 38. Notamos que hay un corrimiento al rojo grande del pico principal con respecto al de las redes cuadrada y rectangular, y que hay picos grandes negativos en la respuesta no diagonal. Las direcciones y valores principales podrían obtenerse diagonalizando la matriz cuyos elementos se muestran en la fig. 38, dando origen a direcciones y eigenvalores complejos que dependerían de la frecuencia. Los eigenvalores sin embargo deben tener necesariamente una parte

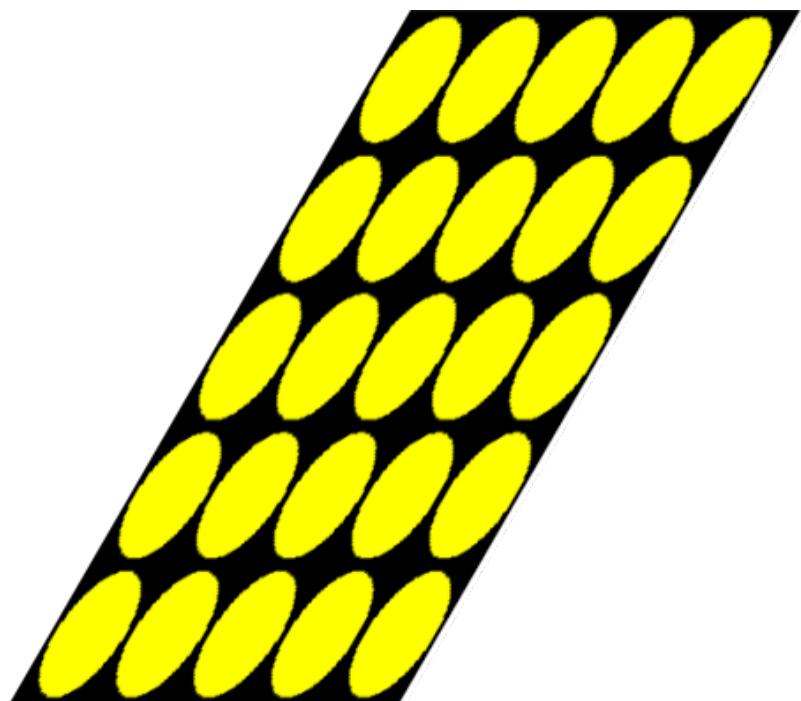


Figura 37: Red oblicua de alambres conductores de Drude obtenida de una deformación de cizalla de la red mostrada en la fig. 34.

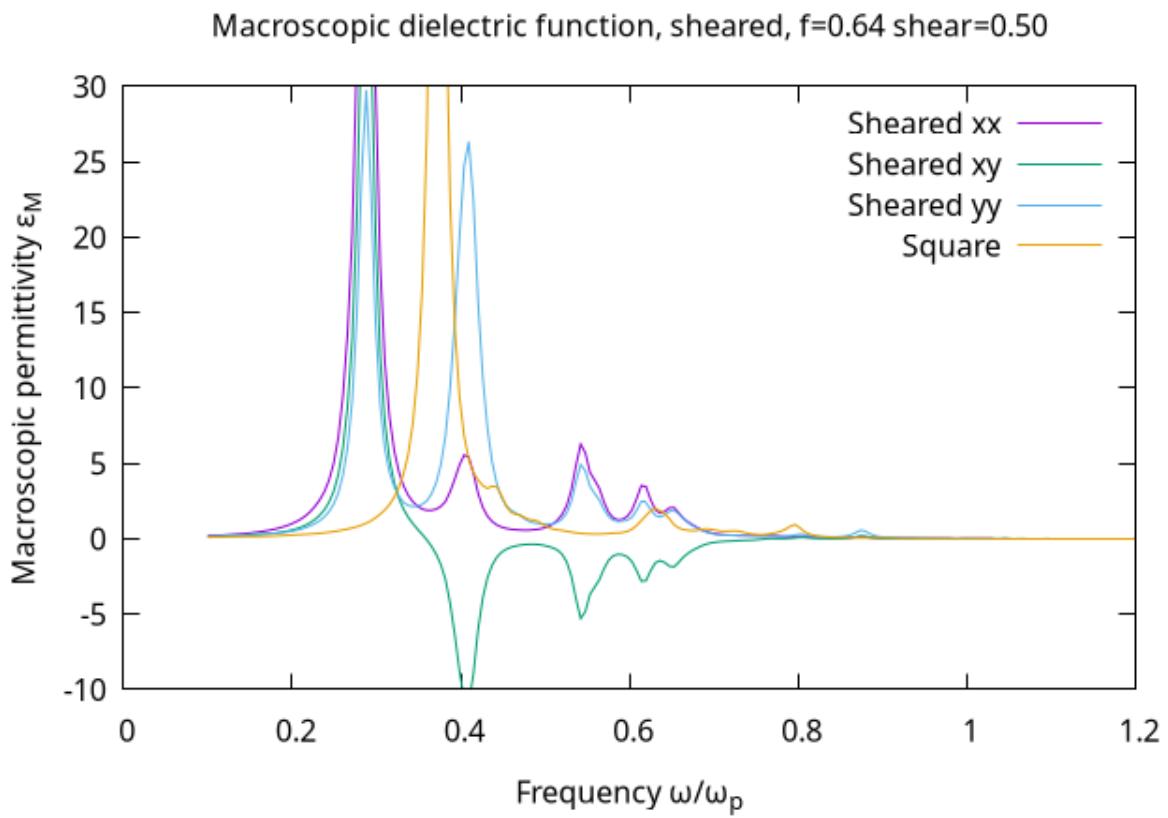


Figura 38: Parte imaginaria de las componentes independientes  $\epsilon_M^{xx}$ ,  $\epsilon_M^{xy} = \epsilon_M^{yx}$  y  $\epsilon_M^{yy}$  de la permitividad macroscópica de la red mostrada en la fig. 37. El resultado correspondiente a la red cuadrada también se muestra para comparar.

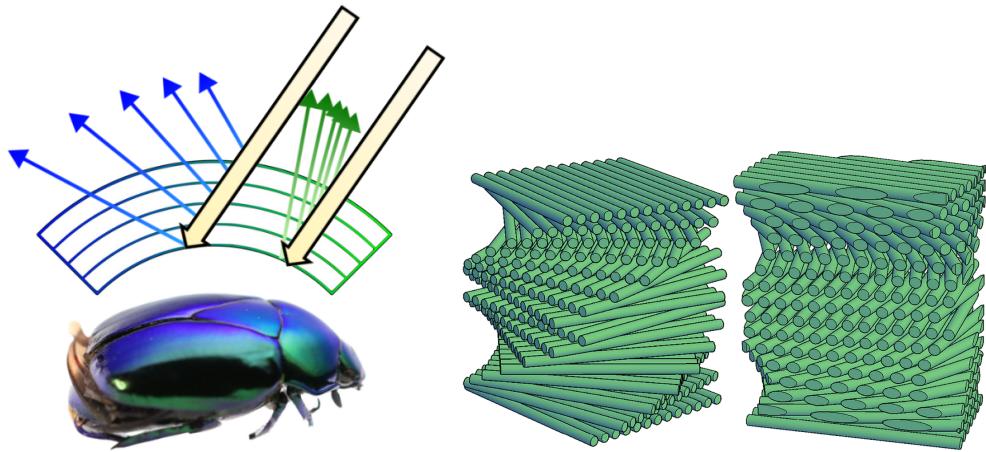


Figura 39: Reflexiones iridiscentes por la cutícula de un insecto (izquierda). La luz multiplemente reflejada de las capas que conforman la cutícula interfieren constructivamente para distintas longitudes de onda en distintos ángulos. Estructura de Bouligand (derecha) consistente en capas formadas de fibras alineadas apiladas una sobre la otra, cada una rotada con respecto a las capas vecinas.

imaginaria positiva.

## 6. Otras aplicaciones

En la sección previa mostramos fragmentos de código para calcular la respuesta macroscópica no retardada de sistemas 2D binarios, el caso más simple. En esta sección presentamos algunos resultados recientes que ilustran cómo nuestro formalismo puede ser útil en un rango amplio de sistemas. En particular, mostramos resultados recientes relacionados con estructuras fotónicas que ocurren en la naturaleza, por ejemplo, en la cutícula de algunos insectos, y que producen reflexiones de tipo metálico que son iridiscentes (su color depende de la dirección desde donde se les observe) y que corresponden a luz con polarización circular. La fig. 39 (izquierda) muestra una fotografía de un insecto iridiscente con reflexiones de tipo metálico azules y verdes. La iridiscencia se debe frecuentemente a la presencia de colores estructurales, colores que se originan no en la absorción selectiva de la luz por pigmentos, sino en las múltiples reflexiones desde superficies de sistemas multicapas las cuales interfieren constructivamente para ciertas longitudes de onda para ciertos ángulos, como se ilustra en la esquina superior izquierda de la figura. Sin embargo, las cutículas de algunos insectos tienen estructuras de Bouligand [4], estructuras de tipo colestérico formadas por delgados filamentos de quitina alineados que forman películas delgadas que se apilan una sobre otra ligeramente rotadas, formando así estructuras helicoidales (fig. 39 derecha). Las propiedades dieléctricas de cada capa son anisotrópicas, pues la respuesta a lo largo de las fibras difiere de la respuesta perpendicular a las mismas [19]. Sin embargo, la permitividad microscópica varía casi continuamente a lo largo de la dirección de apilamiento, de manera que podría esperarse que no hubiera reflexiones ni colores estructurales. Sin embargo, el sistema es periódico, pues la respuesta se repite a sí misma cada media vuelta de la orientación. Para entender la aparición de colores estructurales en este cristal fotónico, calculamos su estructura de bandas fotónicas empleando el paquete *Photonic*. En contraste con los ejemplos presentados en secciones previas, en este caso el periodo del sistema es comparable a la longitud de onda de la luz, la respuesta de cada capa es tensorial pues cada una es anisotrópica, y hay mucho más de dos capas distintas, i.e., éste no es un sistema binario sino un sistema multicomponente. Para obtener la estructura de bandas fotónicas empleamos el módulo *Photonic*:*:WE*:*:ST*:*:GreenP*, el cual usa la ecuación de onda (**Wave Equation**) completa (**WE**) empleando una representación espinorial (**Spinorial**) de ondas de Bloch contra propagantes en el seno de un cristal fotónico multicomponente con una respuesta **Tensorial** (**ST**), para calcular la inversa del operador de onda, i.e., la función de **Green** electromagnética, Proyectada sobre estados con una polarización dada (**GreenP**). Los resultados se muestran en la fig. 40. La figura corresponde a un campo con polarización circular que rota en la dirección de las manecillas del reloj en el plano  $x - y$  y que se propaga a lo largo de la dirección de apilamiento de una estructura de Bouligand con permitividad  $\epsilon_{FF} = 8$  a lo largo de las fibras y  $\epsilon_{NN} = 4$  en la dirección perpendicular. Para vectores de onda  $k$  positivos, esta polarización corresponde a polarización circular derecha con

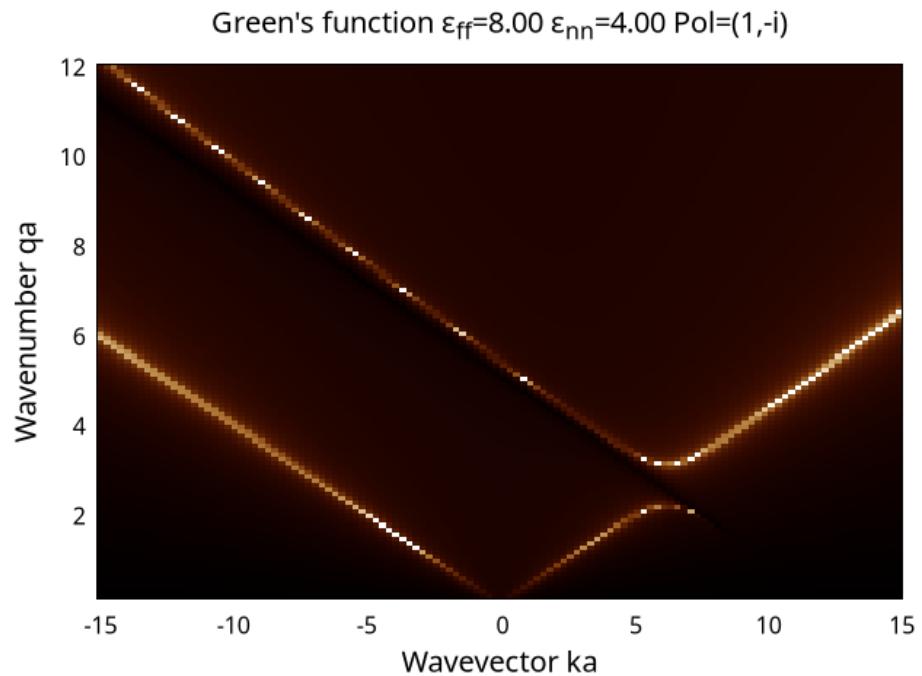


Figura 40: Función de Green electromagnética proyectada sobre un estado de polarización  $(1, -i)$  correspondiente a un campo electromagnético que rota en la dirección de las manecillas del reloj en un medio derecho de Bouligand con un paso  $a$ , como función del vector de onda normalizado  $ka$  y de la frecuencia normalizada  $\omega a/c \equiv qa$ . La permitividad fue elegida como 8 a lo largo de las fibras y como 4 a lo largo de su normal. Puede observarse una brecha en  $ka = 2\pi$ .

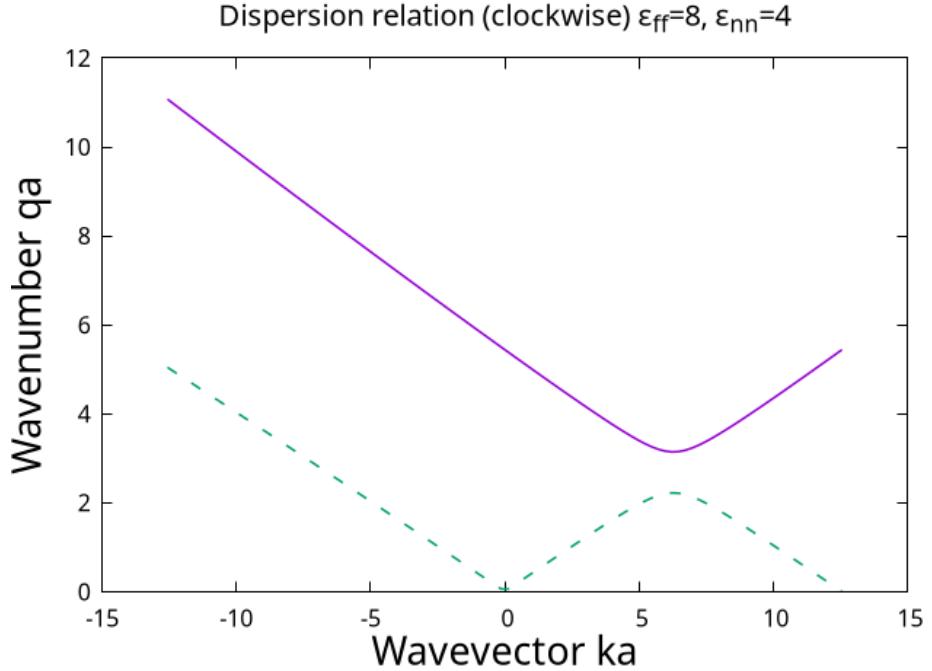


Figura 41: Relación de dispersión exacta para la estructura de Bouligand mostrada en la fig. 40.

helicidad negativa. Para  $k$  negativa la interpretación debe revertirse, y correspondería a polarización izquierda con helicidad positiva. Notamos una región brillante en la figura, correspondiente a un valor grande de la función de Green, lo cual corresponde a un campo que satisface la ecuación de onda sin fuentes, es decir, a un modo normal progante del sistema. La figura muestra una brecha prohibida, una región en la que no hay propagación posible para un vector de onda  $k = 2\pi/a$  y frecuencias alrededor de  $\omega \in (2,2,3,1) \times c/a$  para polarización circular que corresponda a la helicidad de la estructura de Bouligand, i.e., la brecha aparece para polarización circular derecha en una estructura de Bouligand que se asemeja a un tornillo derecho, y para polarización circular izquierda para estructuras que se asemejan a un tornillo izquierdo. Si el sistema fuese iluminado con luz polarizada circularmente con una frecuencia que caiga dentro de esta brecha, sería totalmente reflejada o sería transmitida, dependiendo de la orientación de su polarización. Si luz natural blanca iluminara esta estructura, algunos de sus colores cuya frecuencia empate con la brecha serían reflejados, y la reflexión tendría polarización circular, mientras que otros colores y otras polarizaciones serían transmitidas. Luego, la fig. 40 explica cualitativamente la observación de las propiedades ópticas de cutículas de insectos [4, 19, 17]. Resulta que este sistema particular puede resolverse de manera exacta [17]. La fig. 41 muestra la solución exacta analítica. Una comparación con la fig. 40 muestra una correspondencia perfecta con la solución numérica obtenida con *Photonic*.

## 7. Conclusiones

Hemos desarrollado un formalismo que permite obtener la permitividad macroscópica y el campo electromagnético microscópico de metamateriales y cristales fotónicos hechos de un número arbitrario de partículas de formas arbitrarias hechas de materiales arbitrarios embebidas en medios arbitrarios. Por arbitrarios queremos decir que pueden bien ser, dieléctricos transparentes no dispersivos o conductores opacos, dispersivos y disipativos, o cualquier tipo de material intermedio, cada uno caracterizado por una permitividad isotrópica o por un tensor dieléctrico anisotrópico. La frecuencia del campo puede corresponder a la región visible o a la región de microondas o de radio, o a cualquier otra frecuencia, y la longitud de onda puede ser pequeña o grande comparada con el tamaño de las partículas y de su separación. La dimensionalidad del sistema puede ser arbitraria también, 1, 2, 3... Hemos implementado el formalismo en un paquete libre y abierto, *Photonic*, escrito en *Perl* y empleando su extensión *Perl Data Language* para el procesamiento numérico eficiente y el sistema de objetos *Moo* para organizar y en-

samblar sus diversas componentes. La implementación está basada en la *recursión de Haydock*, la cual permite construir eficientemente matrices tridiagonales que representan a los operadores relevantes. Hemos evitado operar con grandes matrices densas realizando parte de los cálculos en el espacio real y otras partes en el espacio recíproco. Hay diversos módulos correspondientes a distintos casos especiales. Discutimos con cierto detalle el caso de metamateriales binarios en el límite no retardado, pues es el más simple. Ilustramos el uso del paquete a través de ejemplos, calculando la respuesta de una red de alambres metálicos y sus cambios cuando el sistema se sujeta a deformaciones, y comparamos los resultados con los de aproximaciones simples analíticas. También mostramos algunos resultados para sistemas anisotrópicos multicomponentes en el régimen retardado, obteniendo las bandas fotónicas de ciertos cristales fotónicos quirales y explicamos las curiosas propiedades ópticas de algunas estructuras biológicas. Esperamos que este paquete se convierta en una herramienta útil para otros investigadores y estudiantes en el área.

## Agradecimientos

WLM agradece el apoyo de DGAPA-UNAM mediante el proyecto No. IN109822. GPO agradece el apoyo financiero de SGCyT-UNNE a través del proyecto No. PI18F008. Reconocemos las contribuciones de Andrea López Reyna, Raksha Singla, Lucila Juárez, José Samuel Pérez, Bernardo Mendoza and Ed J al desarrollo del paquete y de Merlyn Juárez por encapsularlo en contenedores y revisar su documentación, así como por su revisión crítica del presente texto.

## Referencias

- [1] V. M. Agranovich and Yu. N. Gartstein. Electrodynamics of metamaterials and the Landau–Lifshitz approach to the magnetic permeability. *Metamaterials*, 3(1):1–9, March 2009.
- [2] Amir Arbabi and Andrei Faraon. Advances in optical metalenses. *Nature Photonics*, 17(1):16–25, January 2023.
- [3] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin. *Solid State Physics*. John Wiley & Sons, 1976.
- [4] Y. Bouligand. Twisted fibrous arrangements in biological materials and cholesteric mesophases. *Tissue and Cell*, 4(2):189–217, 1972.
- [5] Stéphane Ducasse, Michele Lanza, and Sander Tichelaar. Moose: An extensible language-independent environment for reengineering object-oriented systems. In *Proceedings of the Second International Symposium on Constructing Software Engineering Tools (CoSET 2000)*, volume 4. IEEE, 2000.
- [6] J. C. Maxwell Garnett. XII. Colours in metal glasses and in metallic films. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 203(359–371):385–420, jan 1904.
- [7] K Glazebrook and F Economou. Pdl: The perl data language. *Dr. Dobb's Journal*, 22(9), 1997.
- [8] Karl Glazebrook, Tuomas J. Lukka, Christian Soeller, and other PDL developers. Perl Data Language: Scientific computing with perl.
- [9] R. Haydock. The recursive solution of the Schrödinger equation. *Solid State Physics*, 35:215, 1980.
- [10] Yuhao Huang, Menghang Shi, Aodi Yu, and Li Xia. Design of multifunctional all-optical logic gates based on photonic crystal waveguides. *Applied Optics*, 62(3):774, jan 2023.
- [11] Lucila Juárez-Reyes and W. Luis Mochán. Magnetic Response of Metamaterials. *physica status solidi (b)*, 255(4):1700495, April 2018.
- [12] Ulises R. Meza, Bernardo S. Mendoza, and W. Luis Mochán. Second-harmonic generation in nanostructured metamaterials. *Phys. Rev. B*, 99(12):125408, March 2019.

- [13] W. Luis Mochán, Guillermo Ortiz, Bernardo S. Mendoza, Lucila Juárez-Reyes José Samuel Pérez-Huerta, and Merlyn J. Juárez-Gutiérrez. Photonic. Comprehensive Perl Archive Network (CPAN), 2016. Perl package for calculations on metamaterials and photonic structures.
- [14] W. Luis Mochán, Guillermo P. Ortiz, and Bernardo S. Mendoza. Efficient homogenization procedure for the calculation of optical properties of 3D nanostructured composites. *Opt. Express*, 18(21):22119–22127, October 2010.
- [15] W. Luis Mochán, Raksha Singla, Lucila Juárez, and Guillermo P. Ortiz. Recursive Calculation of the Optical Response of Multicomponent Metamaterials. *physica status solidi (b)*, 257(5):1900560, 2020.
- [16] W. Luis Mochán and Rubén G. Barrera. Electromagnetic response of systems with spatial fluctuations. I. General formalism. *Physical Review B*, 32(8):4984–4988, oct 1985.
- [17] Wolf Luis Mochán, Andrea López-Reyna, and Guillermo P. Ortiz. Efficient Homogenization of Multicomponent Metamaterials: Chiral Effects. *physica status solidi (b)*, page 2400526, nov 2024.
- [18] J S Pérez-Huerta, Guillermo P Ortiz, Bernardo S Mendoza, and W Luis Mochán. Macroscopic optical response and photonic bands. *New Journal of Physics*, 15(4):043037, April 2013.
- [19] L.A. Rodriguez, Achitte Schmutzler, H.C., Dufek, M.T., Ortiz, G.P., and Mochán, W. Luis. Anisotropic optical response of the cuticle of arthropods. *Opt. Pura Apl.*, 56(2):51131, June 2023.
- [20] Matt S. Trout. Moo - minimalist object orientation.
- [21] Jason Valentine, Shuang Zhang, Thomas Zentgraf, Erick Ulin-Avila, Dentcho A. Genov, Guy Bartal, and Xiang Zhang. Three-dimensional optical metamaterial with a negative refractive index. *Nature*, 455:376–379, 2008.
- [22] E. Yablonovitch. Photonic Crystals. *Journal of Modern Optics*, 41(2):173–194, feb 1994.
- [23] Nikolay I. Zheludev and Yuri S. Kivshar. From metamaterials to metadevices. *Nature Mater*, 11(11):917–924, November 2012.

# Evolución temporal de un sistema optomecánico con acoplamientos lineal y cuadrático

José Récamier, Luis A. Medina Dozal, Alejandro Urzúa

Instituto de Ciencias Físicas, UNAM

Octubre 23, 2024

## Resumen

En este trabajo utilizamos métodos de álgebras de Lie para construir el operador de evolución temporal exacto para un sistema optomecánico que se acopla con un campo electromagnético mediante términos lineal y cuadrático. Analizamos la relevancia de cada término en función de su intensidad.

## 1. Introducción

La optomecánica explora la interacción entre la radiación electromagnética y un movimiento nanomecánico o micromecánico. La luz porta momento lo cual da origen a fuerzas de presión de radiación. Estas fuerzas fueron postuladas por Kepler en 1619 y por Maxwell muchos años después. La primera demostración experimental de estas fuerzas se dió en 1901 por Levedew. En 1909, Einstein derivó la estadística de las fluctuaciones de las fuerzas de presión de radiación que actúan sobre un espejo móvil [1]. En la década de los 70's Ashkin demostró que haces de luz láser enfocados pueden usarse para atrapar y controlar partículas dieléctricas [2], la posible aplicación de usar estas fuerzas para enfriar el movimiento atómico fue propuesta, entre otros, por Wineland en 1975 [3]. El enfriamiento laser fue ampliamente desarrollado en los 80's y su uso ha permitido llevar el movimiento de iones a su estado base y es fundamental para los experimentos de átomos ultra fríos. En los 90's se empezaron a explorar teóricamente, diversos aspectos de sistemas de cavidades optomecánicas cuánticas como la compresión de la luz y la detección de la intensidad de la luz que aprovecha la nolinealidad efectiva tipo Kerr generada por la interacción optomecánica (este punto lo revisaremos más tarde, en la sección de Teoría). Se predijo también que, para acoplamientos optomecánicos grandes las no-linealidades cuánticas darían origen a estados enredados no clásicos del campo de luz y del oscilador mecánico [4, 5].

El sistema optomecánico más simple consiste en una cavidad unimodal Fabry-Pérot con un espejo móvil que se acopla con un oscilador mecánico. Estos resonadores ópticos se pueden realizar experimentalmente en muy diversas formas con lo cual se pueden obtener distintos valores de las constantes de acoplamiento entre el campo y el oscilador mecánico. La referencia [6] es un excelente artículo de revisión de sistemas optomecánicos que cubre hasta el 2014.

## 2. Teoría

Como mencionamos arriba, el sistema optomecánico más simple consta de una cavidad unimodal con un espejo móvil acoplada con un oscilador mecánico. Debido a la presión de radiación, la longitud de la cavidad puede verse modificada por lo cual su frecuencia de resonancia se hace una función de la posición, se tiene también la contribución del oscilador mecánico. El Hamiltoniano que describe este sistema es [7]:

$$\hat{H} = \hbar\omega(x)\hat{n} + \hbar\omega_m\hat{N} \quad (1)$$

con  $\hat{N} = \hat{b}^\dagger\hat{b}$  el operador de número de fonones, y  $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$  el operador de número de fotones. La frecuencia de resonancia de la cavidad, considerando desplazamientos pequeños en comparación con la longitud original de la cavidad  $\frac{\hat{x}}{L} \ll 1$  es:

$$\omega(x) = \frac{\pi c}{L + \hat{x}} = \omega_c \left( \frac{1}{1 + \frac{\hat{x}}{L}} \right) \simeq \omega_c \left( 1 - \frac{\hat{x}}{L} + \frac{\hat{x}^2}{L^2} \right),$$

siendo  $\{\omega_c = \frac{\pi c}{L}, L\}$ , la frecuencia y longitud original de la cavidad. Definimos

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_m}}(\hat{b} + \hat{b}^\dagger) = x_{zpt}(\hat{b} + \hat{b}^\dagger)$$

como el desplazamiento a partir de la posición de equilibrio. Los operadores  $\hat{b}$ ,  $\hat{b}^\dagger$  son los operadores de aniquilación y creación de excitaciones del oscilador mecánico que cumplen la regla de commutación  $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$ .

El Hamiltoniano es entonces:

$$\frac{\hat{H}}{\hbar} = (\omega_c + G_1)\hat{n} + \omega_m\hat{N} - G_0\hat{n}(\hat{b} + \hat{b}^\dagger) + 2G_1\hat{n}\hat{N} + G_1\hat{n}(\hat{b}^2 + \hat{b}^{\dagger 2}). \quad (2)$$

En donde hemos definido

$$G_0 = \omega_c \frac{x_{zpt}}{L}, \quad G_1 = \frac{G_0^2}{\omega_c}.$$

como las constantes de acoplamiento entre el oscilador mecánico y el campo unimodal, estas tienen unidades de frecuencia. En el caso general consideraremos valores independientes de las constantes de acoplamiento  $G_0$  y  $G_1$  ya que éstos dependen del sistema particular bajo estudio. El caso con acoplamiento lineal y un término de forzamiento en el campo fue estudiado en [8] utilizando métodos

de álgebras de Lie para obtener una aproximación al operador de evolución temporal. En este trabajo consideraremos el caso en que el sistema no tiene forzamiento externo con lo cual será posible encontrar la solución exacta al problema.

## 2.1. Sistema optomecánico con acoplamiento lineal

Empezaremos con el caso más simple en el cual solamente se tiene un término de acoplamiento lineal entre el campo y el oscilador mecánico. El Hamiltoniano del sistema se reduce a:

$$\frac{\hat{H}_{opt}}{\hbar} = \omega_c \hat{n} + \omega_m \hat{N} - G_0 \hat{n}(\hat{b} + \hat{b}^\dagger). \quad (3)$$

En la siguiente tabla se muestran las relaciones de commutación entre los operadores que aparecen en el Hamiltoniano.

	$\hat{n}$	$\hat{N}$	$\hat{n}\hat{b}$	$\hat{n}\hat{b}^\dagger$	$\hat{n}^2$
$\hat{n}$	0	0	0	0	0
$\hat{N}$	0	0	$-\hat{n}\hat{b}$	$\hat{n}\hat{b}^\dagger$	0
$\hat{n}\hat{b}$	0	$\hat{n}\hat{b}$	0	$\hat{n}^2$	0
$\hat{n}\hat{b}^\dagger$	0	$-\hat{n}\hat{b}^\dagger$	$-\hat{n}^2$	0	0
$\hat{n}^2$	0	0	0	0	0

Podemos ver que, si incorporamos en el Hamiltoniano un término proporcional a  $\hat{n}^2$  entonces el commutador entre dos elementos cualesquiera del Hamiltoniano será un elemento del mismo, esto es, el conjunto de operadores será cerrado ante la operación de commutación. Esto nos permite utilizar el teorema de Wei-Norman [9, 10] el cual establece que si el Hamiltoniano es una combinación lineal de operadores que cierran ante la operación de commutación, entonces es posible escribir el operador de evolución temporal *de forma exacta* como un producto de exponentiales (Wei-Norman, 1964 *On global representations of the solutions of linear differential equations as a product of exponentials*).

Escribamos entonces el Hamiltoniano del sistema optomecánico como

$$\hat{H}_{opt} = \sum_{n=1}^5 \Phi_n \hat{X}_n \quad (4)$$

con  $\hat{X}_1 = \hat{n}$ ,  $\hat{X}_2 = \hat{N}$ ,  $\hat{X}_3 = \hat{n}\hat{b}$ ,  $\hat{X}_4 = \hat{n}\hat{b}^\dagger$ ,  $\hat{X}_5 = \hat{n}^2$  y el correspondiente operador de evolución temporal es:

$$\hat{U}_{opt} = \prod_{n=1}^5 e^{\alpha_n \hat{X}_n} = e^{\alpha_1 \hat{n}} e^{\alpha_2 \hat{N}} e^{\alpha_3 \hat{n}\hat{b}^\dagger} e^{\alpha_4 \hat{n}\hat{b}} e^{\alpha_5 \hat{n}^2}. \quad (5)$$

Notemos que el Hamiltoniano optomecánico (3) no contiene términos que cambien el número de fotones en la cavidad, entonces éste es solamente un parámetro que modifica la constante de interacción entre el oscilador mecánico y el campo.

Ahora debemos determinar a las funciones  $\alpha_i$  que aparecen en la exponencial. Para hacerlo, sustituimos 5 en la Ec. de Schrödinger para el operador de evolución temporal y encontramos un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias, no lineales que deben satisfacer. En este caso sencillo, es posible integrar dichas ecuaciones y el resultado es

$$\alpha_1 = -i\omega_c t, \quad (6)$$

$$\alpha_2 = -i\omega_m t, \quad (7)$$

$$\alpha_3 = -\frac{G_0}{\omega_m} (1 - e^{i\omega_m t}), \quad (8)$$

$$\alpha_4 = \frac{G_0}{\omega_m} (1 - e^{-i\omega_m t}), \quad (9)$$

$$\alpha_5 = \left( \frac{G_0}{\omega_m} \right)^2 (i\omega_m t - 1 + e^{-i\omega_m t}), \quad (10)$$

nótese que  $\alpha_3 = -\alpha_4^*$ . Normalmente la constante de acoplamiento  $G_0 \ll \omega_m$  [11].

Dado un estado inicial  $|\Psi(0)\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\Gamma\rangle \equiv |\alpha, \Gamma\rangle$ , siendo  $|\alpha\rangle$  un estado coherente del campo y  $|\Gamma\rangle$  un estado coherente del oscilador mecánico, encontramos el estado del sistema a un tiempo  $t$  mediante la aplicación del operador de evolución sobre el estado inicial

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}_{opt}(t)|\Psi(0)\rangle = e^{\alpha_1 \hat{n}} e^{\alpha_2 \hat{N}} e^{\alpha_3 \hat{n} \hat{b}^\dagger} e^{\alpha_4 \hat{n} \hat{b}} e^{\alpha_5 \hat{n}^2} |\alpha, \Gamma\rangle. \quad (11)$$

De acuerdo con Glauber [12] los estados coherentes del oscilador armónico pueden obtenerse a partir de tres definiciones equivalentes, i) como aquellos estados que saturan la relación de incertidumbre de Heisenberg, ii) como aquellos estados que son estados propios del operador de aniquilación  $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$  y iii) como los estados que se obtienen a aplicar el operador de desplazamiento de Glauber  $\hat{D}(\alpha) = \exp[\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}]$  sobre el estado de vacío. Usando cualquiera de estas definiciones se obtiene el siguiente desarrollo en términos de estados de número  $|n\rangle$ :

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (12)$$

Cabe mencionar que para potenciales distintos al del oscilador armónico, los estados coherentes obtenidos darán un resultado diferente dependiendo de la definición utilizada. Por ejemplo, si los construimos como eigenestados de un operador de aniquilación  $\hat{A} = \hat{a}f(\hat{n})$ , con la función  $f(\hat{n})$  una función del operador de número, entonces los estados obtenidos no serán estados de mínima dispersión ni serán iguales a los que se obtengan al aplicar un operador de desplazamiento generalizado [10, 13]. El operador de desplazamiento de Glauber puede ser escrito en forma de un producto de exponentiales como mostramos enseguida

$$\hat{D}(\alpha) = e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha\hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^*\hat{a}},$$

en donde usamos la identidad  $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$ , válida cuando  $[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]=[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]]=0$ . Entonces, puesto que  $\alpha_3=-\alpha_4^*$  podemos escribir:

$$e^{\alpha_3 \hat{n} \hat{b}^\dagger} e^{-\alpha_3^* \hat{n} \hat{b}} = e^{\frac{1}{2}|\alpha_3|^2 \hat{n}^2} \hat{D}_{\hat{b}}(\alpha_3 \hat{n}).$$

Cuando aplicamos el operador de desplazamiento a un estado coherente, el resultado es una fase que multiplica a la suma de los estados coherentes [14]:

$$D(\alpha)|\beta\rangle = e^{\frac{1}{2}(\alpha^*\beta - \alpha\beta^*)}|\alpha + \beta\rangle = e^{i\text{Im}\{\alpha^*\beta\}}|\alpha + \beta\rangle.$$

Podemos entonces escribir el operador de evolución temporal dado en la Ec.5 como:

$$\hat{U}_{opt}(t) = e^{\alpha_1 \hat{n}} e^{\alpha_2 \hat{N}} e^{(\frac{1}{2}|\alpha_3|^2 + \alpha_5) \hat{n}^2} \hat{D}_{\hat{b}}(\alpha_3 \hat{n}). \quad (13)$$

Aplicando el operador de evolución al estado inicial obtenemos:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}} e^{-i(\omega_c t - \text{Im}(\alpha_3 \Gamma^*))k} e^{i(G_0/\omega_m)^2 (\omega_m t - \sin(\omega_m t))k^2} |k, \Gamma_k(t)\rangle \quad (14)$$

con

$$\Gamma_k(t) = (\Gamma + k\alpha_3) e^{-i\omega_m t} = \Gamma e^{-i\omega_m t} - k \frac{G_0}{\omega_m} (e^{-i\omega_m t} - 1),$$

notamos la presencia de enredamiento entre el campo y el oscilador mecánico.

Una vez que conocemos el operador de evolución temporal podemos calcular el valor medio de cualquier observable del sistema. Consideremos el número medio de fonones dado como

$$\langle \Psi(t) | \hat{N} | \Psi(t) \rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2k}}{k!} |\Gamma + \alpha_3 k|^2, \quad (15)$$

la suma puede hacerse explícitamente obteniendo el resultado (tomando  $\Gamma \in \mathbb{R}$ ).

$$\langle \hat{N}(t) \rangle = \Gamma^2 + 2 \left( \frac{G_0}{\omega_m} \right) (1 - \cos \omega_m t) \left[ \left( \frac{|\alpha|^2 G_0}{\omega_m} \right) (|\alpha|^2 + 1) - |\alpha|^2 \Gamma \right]. \quad (16)$$

La expresión anterior puede generalizarse a:

$$\langle \Gamma, \psi | \hat{N}(t) | \psi, \Gamma \rangle = \Gamma^2 + 2 \left( \frac{G_0}{\omega_m} \right) (1 - \cos \omega_m t) \left[ \left( \frac{G_0}{\omega_m} \right) \langle \psi | \hat{n}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{n} | \psi \rangle \Gamma \right].$$

Donde  $|\psi\rangle$  es cualquier estado inicial del campo. En la figura 1 mostramos la evolución temporal del número medio de fonones en función del valor de la constante de acoplamiento  $G_0$  para un campo con  $n = 4$  y el oscilador mecánico en un estado coherente con  $\Gamma = 2$ . Notamos que para valores pequeños de ésta ( $G_0/\omega_m \ll 1$ ), el número medio de fonones es una función periódica decreciente, esto es, el oscilador mecánico se enfria y regresa al valor inicial de forma periódica. Aumentando la constante de acoplamiento notamos un mayor enfriamiento llegando prácticamente a cero pero, cuando el valor de la constante de acoplamiento aumenta más, el número medio de fonones cambia drásticamente su comportamiento llegando a calentar al oscilador mecánico [15].

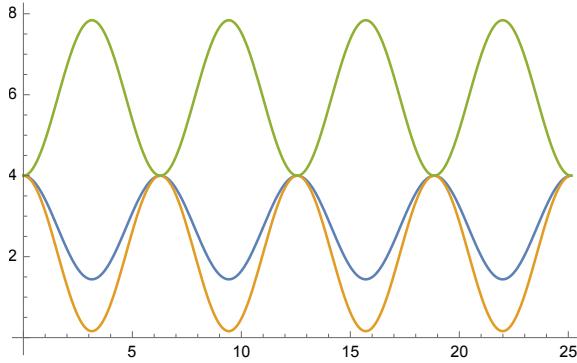


Figura 1: Valor medio del número de fonones para un estado inicial con  $n = 4$ ,  $\Gamma = 2$ ,  $G_0 = 0,1$  (azul),  $G_0 = 0,3$  (naranja) y  $G_0 = 0,6$  (verde). La frecuencia del oscilador mecánico es  $\omega_m = 1$ .

## 2.2. Sistema optomecánico lineal y cuadrático

Regresemos al Hamiltoniano dado en la Ec. 2

$$\frac{\hat{H}}{\hbar} = (\omega_c + G_1)\hat{n} + \omega_m\hat{N} - G_0\hat{n}(\hat{b} + \hat{b}^\dagger) + 2G_1\hat{n}\hat{N} + G_1\hat{n}(\hat{b}^2 + \hat{b}^{\dagger 2}),$$

en donde ahora vamos a conservar todos los términos. Primero notemos que el operador de número de fotones  $\hat{n}$  es una constante de movimiento ya que  $[\hat{H}, \hat{n}] = 0$ , entonces podemos interpretar el Hamiltoniano como un Hamiltoniano en el cual el número de fotones es un parámetro y escribir un Hamiltoniano para cada valor de este parámetro

$$\begin{aligned} \frac{\hat{H}^{(n)}}{\hbar} &= (\omega_c + G_1)n + \omega_m\hat{N} - G_0n(\hat{b} + \hat{b}^\dagger) + 2G_1n\hat{N} + G_1n(\hat{b}^2 + \hat{b}^{\dagger 2}) \\ &\equiv \sum_{0 \leq i+j \leq 2} \Phi_{i,j}^{(n)} \hat{b}^{\dagger i} \hat{b}^j, \end{aligned}$$

y vemos que los únicos operadores que aparecen en el Hamiltoniano son  $\{\hat{b}, \hat{b}^\dagger, \hat{N}, \hat{b}^2, \hat{b}^{\dagger 2}, \mathcal{I}\}$  los cuales forman un álgebra de Lie finita, esto es, el conjunto es cerrado ante conmutación por lo cual es posible aplicar el teorema de Wei-Norman y escribir el operador de evolución temporal como

$$\hat{U}^{(n)} = e^{\beta_1^{(n)}\hat{b}^{\dagger 2}} e^{\beta_2^{(n)}\hat{b}^\dagger} e^{\beta_3^{(n)}\hat{N}} e^{\beta_4^{(n)}\hat{b}} e^{\beta_5^{(n)}\hat{b}^2} e^{\beta_6^{(n)}} \quad (17)$$

Procediendo de manera similar a la utilizada para el caso con acoplamiento puramente lineal, se obtiene un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias

para las funciones  $\beta_i^{(n)}$

$$\dot{\beta}_1^{(n)} = -i(\Phi_{2,0}^{(n)} + 4\beta_1^{(n)2}\Phi_{0,2}^{(n)} + 2\beta_1^{(n)}\Phi_{1,1}^{(n)}) \quad (18)$$

$$\dot{\beta}_2^{(n)} = -i(\Phi_{1,0}^{(n)} + 2\beta_1^{(n)}\Phi_{0,1}^{(n)} + 4\beta_1^{(n)}\beta_2^{(n)}\Phi_{0,2}^{(n)} + \beta_2^{(n)}\Phi_{1,1}^{(n)}) \quad (19)$$

$$\dot{\beta}_3^{(n)} = -i(\Phi_{1,1}^{(n)} + 4\beta_1^{(n)}\Phi_{0,2}^{(n)}) \quad (20)$$

$$\dot{\beta}_4^{(n)} = -i(\Phi_{0,1}^{(n)} + 2\beta_2^{(n)}\Phi_{0,2}^{(n)})e^{\beta_3^{(n)}} \quad (21)$$

$$\dot{\beta}_5^{(n)} = -i\Phi_{0,2}^{(n)}e^{2\beta_3^{(n)}} \quad (22)$$

$$\dot{\beta}_6^{(n)} = -i(\Phi_{0,0}^{(n)} + \beta_2^{(n)}\Phi_{0,1}^{(n)} + \Phi_{0,2}^{(n)}(2\beta_1^{(n)} + \beta_2^{(n)2})) \quad (23)$$

con las condiciones iniciales  $\beta_i^{(n)}(t = t_0) = 0$ . Es claro que ya no será posible obtener las funciones  $\beta_i^{(n)}$  de forma analítica sino que habrá que recurrir a una solución numérica.

Conocido el operador de evolución temporal podemos calcular el valor esperado de las observables. Para el caso de el operador de número de fonones  $\hat{N}$  tenemos:

$$\langle \hat{N}(t) \rangle = \langle \Psi(0) | \hat{U}^{(n)\dagger}(t) \hat{N} \hat{U}^{(n)}(t) | \Psi(0) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{N} | \Psi(t) \rangle \quad (24)$$

El operador de número de fonones en la representación de Heisenberg es:

$$\begin{aligned} \hat{N}(n, t) &= \hat{U}^{(n)\dagger}(t) \hat{b}^\dagger \hat{b} \hat{U}^{(n)}(t) \\ &= (\hat{U}^{(n)\dagger}(t) \hat{b}^\dagger \hat{U}^{(n)}(t)) (\hat{U}^{(n)\dagger}(t) \hat{b} \hat{U}^{(n)}(t)) \end{aligned} \quad (25)$$

tomando la forma explícita del operador  $\hat{U}^{(n)}(t)$  y aplicando la transformación obtenemos:

$$\begin{aligned} \hat{U}^{(n)\dagger} \hat{b}^\dagger \hat{U}^{(n)} &= e^{i\omega_m t} \left( e^{-\alpha_3^{(n)}} \hat{b}^\dagger - 2\alpha_5^{(n)} e^{-\alpha_3^{(n)}} \hat{b} - \alpha_4^{(n)} e^{-\alpha_3^{(n)}} \right) \\ &\equiv f_1^{(n)} \hat{b}^\dagger + f_2^{(n)} \hat{b} + f_3^{(n)} \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \hat{U}^{(n)\dagger} \hat{b} \hat{U}^{(n)} &= e^{-i\omega_m t} \left( \left( e^{\alpha_3^{(n)}} - 4\alpha_1^{(n)}\alpha_5^{(n)} e^{-\alpha_3^{(n)}} \right) \hat{b} + 2\alpha_1^{(n)} e^{-\alpha_3^{(n)}} \hat{b}^\dagger \right) \\ &+ e^{-i\omega_m t} \left( \alpha_2^{(n)} - 2\alpha_1^{(n)}\alpha_4^{(n)} e^{-\alpha_3^{(n)}} \right) \\ &\equiv f_4^{(n)} \hat{b} + f_5^{(n)} \hat{b}^\dagger + f_6^{(n)} \end{aligned} \quad (27)$$

de donde, el operador de número de fonones en la representación de Heisenberg es:

$$\begin{aligned} \hat{N}(n, t) &= \left( f_1^{(n)} f_4^{(n)} + f_2^{(n)} f_5^{(n)} \right) \hat{N} + \left( f_2^{(n)} f_5^{(n)} + f_3^{(n)} f_6^{(n)} \right) \mathcal{I} + f_1^{(n)} f_5^{(n)} \hat{b}^{\dagger 2} \\ &+ f_2^{(n)} f_4^{(n)} \hat{b}^2 + \left( f_1^{(n)} f_6^{(n)} + f_3^{(n)} f_5^{(n)} \right) \hat{b}^\dagger + \left( f_2^{(n)} f_6^{(n)} + f_3^{(n)} f_4^{(n)} \right) \hat{b} \end{aligned}$$

Si tomamos como estado inicial del sistema una cavidad con  $n$  fotones y un oscilador mecánico en un estado coherente  $|\Gamma\rangle$ ,  $|\Psi(0)\rangle = |n\rangle \otimes |\Gamma\rangle$  obtenemos:

$$\begin{aligned}\langle \hat{N}(n, t) \rangle &= (f_1 f_4 + f_2 f_5) |\Gamma|^2 + (f_2 f_5 + f_3 f_6) + f_1 f_5 \Gamma^{*2} + f_2 f_4 \Gamma^2 \\ &\quad + (f_1 f_6 + f_3 f_5) \Gamma^* + (f_2 f_6 + f_3 f_4) \Gamma \\ &\equiv \Psi_0 |\Gamma|^2 + \Psi_1 + \Psi_2 \Gamma^{*2} + \Psi_3 \Gamma^2 + \Psi_4 \Gamma^* + \Psi_5 \Gamma\end{aligned}\quad (28)$$

en donde por simplicidad en la notación hemos omitido la dependencia de las funciones  $f_i$  en el parámetro  $n$ . A partir del cálculo numérico, se puede comprobar que  $f_1 = f_4^*$ ,  $f_2 = f_5^*$  y  $f_3 = f_6^*$  que es una manera de checar que el cálculo es correcto.

Si el estado inicial del campo es un estado coherente  $|\alpha\rangle$ , entonces

$$\langle \hat{N}(\alpha, t) \rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2k}}{k!} \langle \hat{N}(k, t) \rangle \quad (29)$$

El caso de un sistema optomecánico con acoplamiento solamente cuadrático, se obtiene a partir del caso general haciendo  $G_0 = 0$  y dejando  $G_1$  como un número independiente de  $G_0$ . Este sistema fue estudiado en [16].

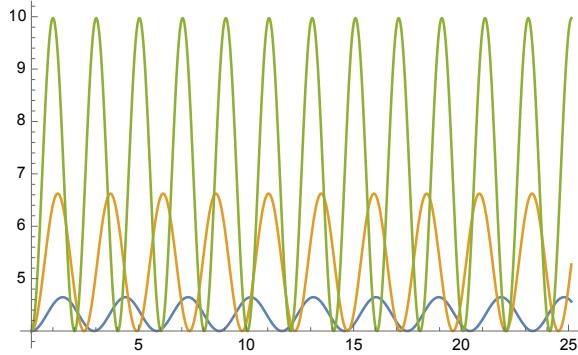


Figura 2: Valor medio del número de fonones para un estado inicial con  $n = 4$ ,  $\Gamma = 2$ ,  $G_0 = 0,0$ ,  $G_1 = 0,01$  (azul),  $G_1 = 0,04$  (naranja) y  $G_1 = 0,09$  (verde). La frecuencia del oscilador mecánico es  $\omega_m = 1$ .

En la figura 2 se muestra la evolución temporal del número medio de fonones dado un estado inicial  $|n = 4, \Gamma = 2\rangle$  cuando solamente se tiene el término con acoplamiento cuadrático. Podemos observar que el número de fonones es una función oscilatoria que siempre toma valores mayores al inicial y regresa periódicamente a éste. Notamos también que la frecuencia de las oscilaciones y la amplitud de estas se incrementa conforme aumenta el valor de la constante de acoplamiento. En todos los casos que se muestran en la figura el valor de la constante de acoplamiento  $G_1$  es menor a  $\omega_m/10$ .

En la figura 3 se muestra la evolución del número de fonones partiendo del mismo estado inicial cuando se tienen acoplamientos lineal y cuadrático simultáneamente. Los valores de  $G_0$  y de  $G_1$  son los mismos que usamos para la

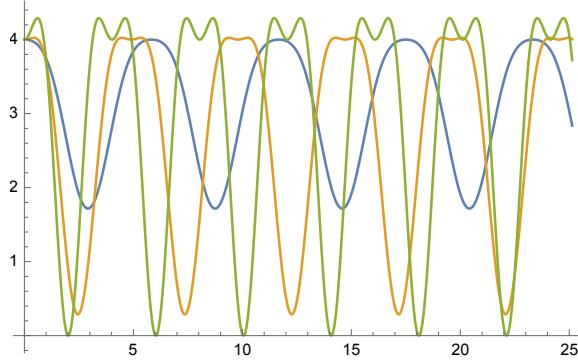


Figura 3: Valor medio del número de fonones para un estado inicial con  $n = 4$ ,  $\Gamma = 2$ ,  $G_0 = 0,1$ ,  $G_1 = 0,01$  (azul),  $G_0 = 0,3$ ,  $G_1 = 0,04$  (naranja) y  $G_0 = 0,6$ ,  $G_1 = 0,09$  (verde). La frecuencia del oscilador mecánico es  $\omega_m = 1$ .

figura 1 y 2 respectivamente. En la primera figura 1 vimos que el comportamiento pasó de ser enfriamiento (disminución del número de fonones) a calentamiento (aumento del número de fonones) dependiendo del valor del acoplamiento  $G_0$ . En la segunda figura 2 notamos siempre un proceso de calentamiento (el número de fonones crece con respecto al inicial) y a mayor valor en la constante de acoplamiento  $G_1$  mayor es el aumento en el número medio de fonones. El comportamiento del sistema cuando se tienen ambos acoplamientos muestra claramente que los efectos no son la suma de los acoplamientos individuales. Solamente en el caso en que el acoplamiento cuadrático es pequeño, se tiene un comportamiento similar al dado en la primera figura.

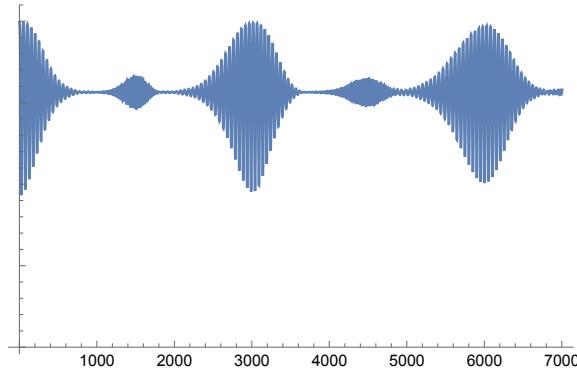


Figura 4: Valor medio del número de fonones para un estado inicial con  $\alpha = 2$ ,  $\Gamma = 2$ ,  $G_0 = 0,1$  y  $G_1 = 0,01$ . La frecuencia del oscilador mecánico es  $\omega_m = 1$ .

Finalmente, en la figura 4 se muestra la evolución del número medio de fonones para el caso en que se tienen acoplamientos lineal  $G_0 = 0,1$  y cuadrático

$G_1 = 0,01$  con un estado inicial que es un producto de estados coherentes del campo  $\alpha = 2$  y del oscilador mecánico  $\Gamma = 2$ . La presencia del acoplamiento cuadrático hace que se produzcan fenómenos de interferencia debido a las diferentes frecuencias involucradas como mencionamos al analizar las figuras 2 y 3. Recordemos que la constante de acoplamiento efectivo depende del valor del número de fotones. Esta figura muestra la presencia de colapsos y reavivamientos también observados cuando se tiene un sistema con acoplamiento puramente cuadrático [16] y nos recuerda el comportamiento de un Hamiltoniano de Jaynes-Cummings [14] en donde un sistema de dos niveles se acopla con el campo de una cavidad. En este caso, se tiene un acoplamiento fuerte entre el sistema atómico y el campo. Los colapsos y reavivamientos que se muestran en la figura dependen del valor de las constantes de acoplamiento, si usamos valores más grandes para  $G_0$  y  $G_1$  los colapsos y reavivamientos se presentan con mayor frecuencia y menor definición.

### 3. Conclusiones

En estas notas hemos presentado un método basado en álgebras de Lie con el que es posible obtener el operador de evolución temporal *exacto* para un sistema cuyo Hamiltoniano forme un álgebra de Lie finita. Aplicamos el método a un sistema optomecánico con acoplamiento lineal y a uno con acoplamientos lineal y cuadrático. En ambos casos se tienen Hamiltonianos cuyos operadores forman un álgebra de Lie finita. Encontramos que en el caso en que el estado inicial del campo es un estado coherente y se tiene un acoplamiento cuadrático no nulo, el sistema presenta colapsos y reavivamientos en el valor esperado del número de fonones, similar al de un sistema tipo Jaynes-Cummings en donde un campo coherente se acopla con un átomo de dos niveles [17]. Cuando el acoplamiento es solamente lineal, no hay estos colapsos y reavivamientos, solamente oscilaciones de Rabi. En estas notas reportamos solamente el cálculo del número medio de fonones, en las referencias [8, 17, 18] podrán encontrar el cálculo del valor medio de las cuadraturas, dispersiones, parámetro de Mandel y función de Husimi para el caso sin forzamiento y con forzamiento del campo así como para un sistema híbrido que consta de un sistema de dos niveles acoplado con un sistema optomecánico.

### Referencias

- [1] Einstein A., 1909, Z. Phys. **10**, 817;  
traducción al inglés en <http://www.pupress.princeton.edu/titles/4453.htm>.
- [2] Ashkin A., 1978 Phys. Rev. Lett. **40**, 729
- [3] Wineland D. J., and H Dehmelt, 1975 Bull. Am. Phys. Soc. **20**, 637
- [4] Bose, S., Jacobs K., Knight P. L. 1997, Phys. Rev. A **56**, 4175

- [5] Mancini S., Man'ko V. I., Tombesi P., 1997 Phys. Rev. A **55**, 3042
- [6] Aspelmeyer M., Kippenberg T., and Marquardt F., 2014 Reviews of Modern Physics **86** (4) 1391
- [7] Meystre P., 2013 Ann. Phys. (Berlin) **525**, 215
- [8] Paredes-Juárez A., Ramos-Prieto I., Berrondo M., y Récamier J., 2020 Phys. Scr. **95**, 035103
- [9] Wei J. and Norman E., 1964 Proc. Am. Math. Soc. **15**, 327-34
- [10] de los Santos-Sánchez O., and Récamier J., 2011 J. Phys. A: Math. Theor. **44**, 145307
- [11] Verghagen E., Deléglise S., Weis S., Schliesser A and Kippenberg T J., 2012 Nature **482** 63.
- [12] Glauber R J., 1963 Phys. Rev. Lett. **10**, 84 ; Phys. Rev. **130**, 2529
- [13] de los Santos-Sánchez O., and Récamier J., 2012 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45** 015502
- [14] Haroche S., Raymond J M., *Exploring the quantum: Atoms, cavities and photons*, Oxford Graduate Texts 2006
- [15] Medina-Dozal L., Récamier J., Moya-Cessa HM., Soto-Eguibar F., Román-Ancheyta R., Ramos-Prieto I., and Urzúa A., 2024 Physica Scripta **99**, 015114
- [16] Machado, JDP., Slooter, RJ., and Blanter Ya. M., 2019 Phys. Rev. A **99**, 053801
- [17] Medina-Dozal L., Ramos-Prieto I., Récamier J., 2020 ENTROPY **22**, 1373
- [18] Medina L., Récamier J., International Journal of Theoretical Physics 2022 **61** 229

# Combate entre la radiación de Casimir y los atajos a la adiabaticidad

Ricardo Román Ancheyta<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>*Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada,*

*Universidad Nacional Autónoma de México,*

*Boulevard Juriquilla 3001, Querétaro 76230, Mexico*

Una dinámica no adiabática del campo electromagnético puede desencadenar la generación de fotones a partir del vacío cuántico. Los atajos a la adiabaticidad, en cambio, son protocolos que imitan la dinámica adiabática del campo a tiempo finito. En este trabajo mostramos cómo el término contradiabático del algoritmo de seguimiento sin transición cancela, exactamente, al término responsable de la producción de fotones en el efecto Casimir dinámico. Este resultado sugiere que la energía necesaria para producir fotones de vacío está relacionada con el costo energético del atajo. Además, si el sistema opera bajo un ciclo termodinámico cuántico, confirmamos una equivalencia entre los trabajos adiabático y no adiabático. Finalmente, nuestro estudio revela que la identificación de estas observaciones no reportadas solo es posible utilizando el llamado enfoque de Hamiltonianos efectivos.

---

\* [ancheyta@fata.unam.mx](mailto:ancheyta@fata.unam.mx)

## I. INTRODUCCIÓN

Desde donde no hay luz (vacío), se pueden crear fotones reales si el campo electromagnético es sometido a cambios no adiabáticos. Este impresionante fenómeno se conoce como el efecto Casimir dinámico (ECD) [1, 2]. Fue predicho por primera vez utilizando una cavidad de longitud variable [3] y confirmado experimentalmente en la arquitectura de circuitos cuánticos superconductores [4, 5]. Además de ser fundamental para la teoría cuántica de campos [6], el ECD puede tener aplicaciones en nanofotónica, nanomecánica y química, ya que modifica la fuerza Casimir estática [1, 7, 8]. Asimismo, el ECD es un proceso de electrodinámica cuántica que ocurre a un tiempo finito y se espera que sea relevante en la termodinámica cuántica de procesos finitos [9–11]. Por ejemplo, en un refrigerador cuántico a bajas temperaturas, el ECD domina e impone un límite último para el enfriamiento [12]. La razón de este límite es un proceso de calentamiento producido por las excitaciones no adiabáticas del ECD que hacen cumplir la tercera ley [13].

Por otro lado, los atajos a la adiabaticidad, llamados STA por sus siglas en inglés, son protocolos que imitan la dinámica de sistemas adiabáticos (cuánticos o clásicos) a tiempos finitos [14–16]. Los STA están recibiendo mucha atención en la termodinámica cuántica, ya que aumentan la potencia de salida de los motores de calor cuánticos al acortar sus procesos adiabáticos (isentropicos) [17–21]. Los STA actúan como lubricantes cuánticos [22], produciendo una evolución sin fricción al contrarrestar las excitaciones no adiabáticas.

Teóricamente, podemos estudiar los STA y el ECD usando al oscilador armónico. Por ejemplo, el trabajo de Muga y colaboradores [23] introdujo uno de los primeros STA basados en el *algoritmo de seguimiento sin transición* [24]; esto autores lograron cambiar la frecuencia de un oscilador sin generar transiciones a un tiempo finito. Para el ECD, una de sus versiones más simples ocurre en una cavidad no estacionaria de un solo modo, modelada precisamente mediante un oscilador armónico con frecuencia dependiente del tiempo.

En este trabajo, utilizando un enfoque de Hamiltonianos efectivos [25], describimos en detalle cómo el potencial no local que surge de los STA combate la generación de fotones en el ECD. Mostramos que los términos de compresión (squeezing en inglés) que aparecen tanto en el ECD como en los STA son los mismos, pero con signos opuestos, lo que implica que la energía necesaria para producir fotones de vacío se relaciona con el costo energético del atajo. Además, con el enfoque de Hamiltonianos efectivos, se hacen transparentes ciertos

resultados de los STA en la termodinámica cuántica, por ejemplo, la equivalencia entre los trabajos adiabático y no adiabático.

Para hacer nuestro artículo lo más autocontenido posible, lo estructuramos de la siguiente manera. Primero, la sección [II A](#) repasa los STA basados en el algoritmo de seguimiento sin transición, y la sección [II B](#) discute el STA del oscilador armónico cuántico con frecuencia dependiente del tiempo. A continuación, la sección [III A](#) describe el enfoque del Hamiltoniano efectivo aplicado al ECD y muestra que el término de compresión responsable de generar fotones es el mismo (con signo opuesto) que el término contradiabático obtenido en la sección [II B](#). Esta observación simplifica la estructura del Hamiltoniano correspondiente y facilita el cálculo del trabajo de salida cuando el sistema opera bajo un ciclo termodinámico cuántico, sección [III B](#). Finalmente, exponemos nuestras conclusiones en la sección [IV](#).

## II. ATAJOS A LA ADIABATICIDAD

### A. Algoritmo de seguimiento sin transición

Revisaremos brevemente la formulación de Berry de los atajos a la adiabaticidad basada en el algoritmo de seguimiento sin transición, ya que es más directa y esclarecedora [[14](#), [24](#)]. Para un Hamiltoniano dependiente del tiempo  $\hat{H}_0(t)$  que satisface  $\hat{H}_0(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle$ , la aproximación adiabática establece que  $|\psi_n(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)}e^{i\theta_n(t)}|n(t)\rangle$  es una solución *aproximada* de la ecuación de Schrödinger cuando  $\hat{H}_0(t)$  varía *lentamente*. Aquí,  $\gamma_n(t) = i \int_0^t dt' \langle n(t') | [\partial_{t'} |n(t')\rangle] \rangle$  y  $\theta_n(t) = - \int_0^t dt' E_n(t') \hbar^{-1}$  son las fases geométricas y dinámicas. A continuación veremos cómo obtener dicha solución aproximada. Con fines pedagógicos, seguiremos el procedimiento realizado en [[26](#)] que describe la aproximación adiabática en mecánica cuántica. Se comienza con la ecuación de Schrödinger  $i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H}_0(t) |\psi(t)\rangle$ . Una solución general es  $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n(t)\rangle$ , donde  $\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t')$  se le conoce como la fase dinámica, y  $|n(t)\rangle$  satisface  $\hat{H}_0(t) |n(t)\rangle = E_n(t) |n(t)\rangle$ .  $c_n(t)$  son los coeficientes de expansión dependientes del tiempo que deben ser determinados. Tomando

la derivada respecto al tiempo de  $|\psi(t)\rangle$  obtenemos

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle &= \sum_n \dot{c}_n(t)e^{i\theta_n(t)}|n(t)\rangle \\ &\quad + \sum_n i\dot{\theta}_n(t)c_n(t)e^{i\theta_n(t)}|n(t)\rangle \\ &\quad + \sum_n c_n(t)e^{i\theta_n(t)}\frac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle, \\ &= \frac{1}{i\hbar}\hat{H}_0(t)|n(t)\rangle.\end{aligned}\tag{1}$$

Usando la ecuación de eigenvalores y observando que  $\dot{\theta}_n(t) = -E_n(t)/\hbar$ , la ecuación anterior se simplifica a  $\sum_n e^{i\theta_n(t)}[\dot{c}_n(t)|n(t)\rangle + c_n(t)\partial_t|n(t)\rangle] = 0$ . Tomando el producto interno con  $\langle m(t)|$  y utilizando la ortonormalidad asociada con los estados propios a tiempos iguales, se obtiene la siguiente ecuación diferencial

$$\dot{c}_m(t) + \sum_n e^{i[\theta_n(t)-\theta_m(t)]}\langle m(t)|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle\right] = 0.\tag{2}$$

Por otro lado, al tomar la derivada temporal de la ecuación del valor propio, obtenemos  $\dot{\hat{H}}_0(t)|n(t)\rangle + \hat{H}_0(t)\partial_t|n(t)\rangle = \dot{E}_n(t)|n(t)\rangle + E_n(t)\partial_t|n(t)\rangle$ . Esto implica que

$$\langle m(t)|\dot{\hat{H}}_0(t)|n(t)\rangle = [E_n(t) - E_m(t)]\langle m(t)|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle\right].\tag{3}$$

Esto significa que

$$\langle m(t)|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n(t)\rangle\right] = \frac{\langle m(t)|\dot{\hat{H}}_0(t)|n(t)\rangle}{E_n(t) - E_m(t)}.\tag{4}$$

Sustituyendo esto en la ecuación para  $\dot{c}_m(t)$  obtenemos

$$\begin{aligned}\dot{c}_m(t) &= -c_m(t)\langle m(t)|\left[\frac{\partial}{\partial t}|m(t)\rangle\right] \\ &\quad - \sum_{n \neq m} c_n(t)e^{i[\theta_n(t)-\theta_m(t)]}\frac{\langle m(t)|\dot{\hat{H}}(t)|n(t)\rangle}{E_n(t) - E_m(t)}.\end{aligned}\tag{5}$$

La aproximación adiabática consiste en no tomar en cuenta el segundo término en el lado derecho de la ecuación anterior [26], es decir,  $\dot{c}_m(t) \approx -c_m(t)\langle m(t)|[\partial_t|m(t)\rangle]$ , que tiene la siguiente solución

$$c_m(t) = \exp\left(-\int_0^t dt' \langle m(t')|\left[\frac{\partial}{\partial t'}|m(t')\rangle\right]\right) c_m(0),\tag{6}$$

lo cual puede reescribirse como  $c_m(t) = e^{i\gamma_m(t)}c_m(0)$ , donde  $\gamma_m(t) \equiv i\int_0^t dt' \langle m(t')|\left[\frac{\partial}{\partial t'}|m(t')\rangle\right]$  se conoce como la fase geométrica o fase de Berry cuando la evolución es cíclica. Por lo

tanto,  $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{i\gamma_n(t)} e^{i\theta_n(t)} |n(t)\rangle$ . Si el sistema comienza en un estado propio,  $|n\rangle$  of  $\hat{H}_0(t=0)$ , entonces continuará en el estado propio  $|n(t)\rangle$  de  $\hat{H}_0(t)$ , ya que  $c_i(0) = 0$  a menos que  $i = n$ , en ese caso  $c_n(0) = 1$ . La solución dentro de la aproximación adiabática es  $|\psi_n(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} e^{i\theta_n(t)} |n(t)\rangle$ .

El objetivo del algoritmo de seguimiento sin transición es encontrar un Hamiltoniano cuántico  $\hat{H}(t)$  tal que  $i\hbar \partial_t |\psi_n(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi_n(t)\rangle$ , sea una solución *exacta* de la correspondiente ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \partial_t |\psi_n(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi_n(t)\rangle. \quad (7)$$

El operador de evolución temporal  $\hat{U}(t)$  también satisface la ecuación de Schrödinger  $i\hbar \partial_t \hat{U}(t) = \hat{H}(t) \hat{U}(t)$ , entonces  $\hat{H}(t)$  puede extraerse de  $\hat{H}(t) = i\hbar \partial_t \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t)$ . El siguiente paso es encontrar una forma explícita del operador de evolución. Afortunadamente, al elegir  $\hat{U}(t) = \sum_n |\psi_n(t)\rangle \langle n(0)|$ , obtenemos  $\hat{U}(t) |m(0)\rangle = |\psi_m(t)\rangle$ . Por lo tanto,  $\hat{U}(t)$  es, de hecho, una elección apropiada, donde su derivada temporal es

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = & \sum_n \left\{ i \dot{\gamma}_n(t) |\psi_n(t)\rangle \langle n(0)| \right. \\ & + i \dot{\theta}_n(t) |\psi_n(t)\rangle \langle n(0)| \\ & \left. + e^{i\gamma_n(t)} e^{i\theta_n(t)} \left[ \frac{\partial}{\partial t} |n(t)\rangle \right] \langle n(0)| \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

Multiplicando la ecuación anterior por  $\hat{U}^\dagger(t)$  conseguimos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} \hat{U}^\dagger(t) = & \sum_n \left\{ i \dot{\gamma}_n(t) |n(t)\rangle \langle n(t)| \right. \\ & + i \dot{\theta}_n(t) |n(t)\rangle \langle n(t)| + \left. \left[ \frac{\partial}{\partial t} |n(t)\rangle \right] \langle n(t)| \right\}. \end{aligned} \quad (9)$$

Por lo tanto, el Hamiltoniano buscado es

$$\hat{H}(t) = \sum_n \left\{ E_n |n\rangle \langle n| + i\hbar (|\partial_t n\rangle \langle n| - \langle n| \partial_t n\rangle |n\rangle \langle n|) \right\}. \quad (10)$$

Nótese que hemos adoptado la notación simplificada  $|n\rangle = |n(t)\rangle$ ,  $E_n = E_n(t)$  y  $|\partial_t n\rangle = \partial |n(t)\rangle / \partial t$ . Uno puede separar  $\hat{H}(t)$  en dos partes,  $\hat{H}(t) \equiv \hat{H}_0(t) + \hat{H}_1(t)$ , donde  $\hat{H}_0(t) = \sum_n E_n |n\rangle \langle n|$  y

$$\hat{H}_1(t) = \sum_n i\hbar (|\partial_t n\rangle \langle n| - \langle n| \partial_t n\rangle |n\rangle \langle n|) \quad (11a)$$

son conocidos como el Hamiltoniano de referencia y el Hamiltoniano contradiabático, respectivamente [24].

## B. Oscilador armónico cuántico dependiente del tiempo

Elegimos el Hamiltoniano de referencia  $\hat{H}_0(t)$  como el Hamiltoniano del oscilador armónico cuántico con frecuencia dependiente del tiempo,  $\omega(t)$  (suponemos  $m = 1$ )

$$\hat{H}_0(t) = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2(t)\hat{x}^2, \quad (12)$$

donde  $\hat{x}$  y  $\hat{p}$  son, respectivamente, los operadores cuánticos de posición y momento que satisfacen la relación canónica de conmutación  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ . Los eigenvalores instantáneos correspondientes son  $E_n(t) = \omega(t)(n + 1/2)$ . Nótese que asignamos la masa del oscilador a la unidad para conectarla con el Hamiltoniano cuántico del campo electromagnético no estacionario en la sección III A. Para obtener  $\hat{H}_1(t)$  se necesita conocer los eigenestados instantáneos  $|n(t)\rangle$  de  $\hat{H}_0(t)$ . En la representación de coordenadas, estos son

$$\begin{aligned} \langle x|n(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left[ \frac{\omega(t)}{\pi\hbar} \right]^{\frac{1}{4}} H_n \left( x\sqrt{\omega(t)/\hbar} \right) \\ &\quad \times \exp \left( -\frac{\omega(t)}{2\hbar} x^2 \right), \end{aligned} \quad (13)$$

donde  $H_n$  son los polinomios de Hermite. Usando la relación de recurrencia de  $H_n$ , Muga y colaboradores [23] probaron que  $\langle n|\partial_t n\rangle = 0$ , simplificando  $\hat{H}_1(t) = i\hbar \sum_n |\partial_t n\rangle \langle n|$ . Al calcular la derivada temporal de (13) se puede demostrar que el término contradiabático para el oscilador armónico cuántico dependiente del tiempo es [23]

$$\hat{H}_1(t) = -\frac{\dot{\omega}(t)}{4\omega(t)}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}), \quad (14)$$

donde el punto en  $\omega(t)$  representa la derivada temporal. El resultado anterior implica que  $|\psi_n(t)\rangle$ , ver sección II A, es una solución exacta de la ecuación de Schrödinger al usar

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{1}{2}\omega^2(t)\hat{x}^2 - \frac{\dot{\omega}(t)}{4\omega(t)}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}). \quad (15)$$

El Hamiltoniano (14) es un operador no local, que representa un potencial no local. Dado que tiene una estructura cuadrática en términos de  $\hat{x}$  and  $\hat{p}$ , el Hamiltoniano (15) puede ser visto como un oscilador armónico generalizado. Aunque la dinámica a tiempo finito generada por  $\hat{H}(t)$  satisface y sigue, de manera exacta, a la solución adiabática del Hamiltoniano de referencia  $\hat{H}_0(t)$ , queremos enfatizar que al observar únicamente la estructura algebraica de la Ec. (15), no es obvio entender por qué esto ocurre. En otras palabras, hasta este

momento no sabemos en detalle cómo el nuevo término contradiabático, proporcional a  $\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}$ , combate la evolución no adiabática generada por el Hamiltoniano del oscilador armónico cuántico dependiente del tiempo (12). Aclarar tal cuestión es, precisamente, el objetivo de este trabajo.

Primero, note que  $\hat{H}_1(t)$  in (14) está asociado con el operador de compresión de la óptica cuántica [27–29], como se demuestra en [23, 30, 31]. En segundo lugar, es bien sabido que el oscilador armónico cuántico dependiente del tiempo genera, durante su evolución, un efecto de compresión en las cuadraturas del sistema. Por lo tanto, es razonable pensar que en (15) el término contradiabático  $\hat{H}_1(t)$  debería de alguna manera compensar la evolución de compresión generada por  $\hat{H}_0(t)$ .

Debido a la discusión anterior, nos gustaría escribir (15) en términos de los operadores escalera. Sin embargo, escribir los operadores de creación y aniquilación adecuados del oscilador armónico cuántico dependiente del tiempo, equivalentes a una métrica espaciotemporal dependiente del tiempo, no es una tarea trivial en absoluto [31–36]. Nosotros, por ejemplo, podría trabajar con los operadores escalera “instantáneos” dados por [23] ( $\hbar = 1$ )

$$\hat{a}_t = \frac{1}{\sqrt{2\omega(t)}} [\omega(t) \hat{x} + i\hat{p}], \quad \hat{a}_t^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\omega(t)}} [\omega(t) \hat{x} - i\hat{p}]. \quad (16)$$

Evidentemente, dado cualquier protocolo comience en  $t = t_0$  y termine en  $t = t_f$ , la frecuencia del oscilador  $\omega(t)$  tendrá los valores fijos  $\omega_0$  y  $\omega_f$  para  $t \leq t_0$  y  $t \geq t_f$ , respectivamente. En esos casos, la Ec. (16) se reduce a la conocida definición de los operadores escalera del oscilador armónico con frecuencia constante [26]. La ecuación (16) implica que  $\hat{x} = (\hat{a}_t^\dagger + \hat{a}_t)/\sqrt{2\omega(t)}$  y  $\hat{p} = i(\hat{a}_t^\dagger - \hat{a}_t)\sqrt{\omega(t)/2}$ , lo cual, al sustituirse en (15) uno obtiene [23]

$$\hat{H}(t) = \omega(t) \left( \hat{a}_t^\dagger \hat{a}_t + \frac{1}{2} \right) - i \frac{\dot{\omega}(t)}{4\omega(t)} (\hat{a}_t^{\dagger 2} - \hat{a}_t^2). \quad (17)$$

Nuevamente, la ecuación anterior no nos proporciona una visión clara de cómo genera la dinámica adiabática del Hamiltoniano de referencia  $\hat{H}_0(t)$ . En cambio, nos ofrece un resultado importante, el segundo término (la compresión) de (17) puede escribirse sin el subíndice temporal  $t$  [23]. Esto se puede hacer debido al hecho de que para cualquier modulación de frecuencia  $\omega(t)$ , la combinación  $i\hat{a}_t^{\dagger 2} - i\hat{a}_t^2$  siempre es igual al término independiente del tiempo  $\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}$ , por lo tanto, el primero puede ser calculado de manera segura a cualquier momento dado. En particular, y para la conveniencia de la discusión de la Sec. III A, lo evaluamos al principio de un protocolo dependiente del tiempo dado, es decir, a lo largo del

artículo siempre escribiremos  $\hat{H}_1(t) = -i\dot{\omega}(t)(\hat{a}_0^{\dagger 2} - \hat{a}_0^2)/4\omega(t)$ . Por el contrario, el primer término de (17),  $\hat{a}_t^\dagger \hat{a}_t + 1/2$ , no es igual a ninguna combinación independiente del tiempo de  $\hat{x}$  and  $\hat{p}$ . En realidad, el Hamiltoniano de referencia (12) escrito en términos de los operadores escalera instantáneos (16) a  $t = t_0$  se ve como

$$\begin{aligned}\hat{H}_0(t) = \omega_0 & \left( \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + \frac{1}{2} \right) \left[ \frac{\omega^2(t)}{2\omega_0^2} + \frac{1}{2} \right] \\ & + \omega_0 (\hat{a}_0^{\dagger 2} + \hat{a}_0^2) \left[ \frac{\omega^2(t)}{4\omega_0^2} - \frac{1}{4} \right].\end{aligned}\quad (18)$$

Para evitar cualquier confusión, tenga en cuenta que  $\omega(t)$  en la ecuación de arriba proviene del Hamiltoniano de referencia (12), mientras que  $\omega_0$  es la frecuencia a la que los operadores escalera instantáneos (16) están definidos. Como era de esperar, si  $\omega(t) \rightarrow \omega_0$ ,  $\hat{H}_1(t) = 0$  y  $\hat{H}(t) \rightarrow \hat{H}_0(t) = \omega_0(\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + 1/2)$ . Cuando la modulación de frecuencia tiene la forma  $\omega(t) = \omega_0 + f(t)$ , con  $f(t)$  una función dependiente del tiempo arbitraria (usualmente periódica),  $\hat{H}_0(t) = \omega_0(\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + 1/2) + f^2(t)(\hat{a}_0^{\dagger 2} + \hat{a}_0^2 + 2\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 + 1)/4\omega_0$  tiene una estructura algebraica que se ha utilizado para investigar la evolución de los estados coherentes en un medio Kerr [37]. Vale la pena mencionar que (18) posee un término de compresión independiente del tiempo ( $\hat{a}_0^{\dagger 2} + \hat{a}_0^2$ ), que, desafortunadamente, no puede ser eliminado con el que se encuentra en  $\hat{H}_1(t)$ . Sin embargo, en la siguiente sección, mostramos explícitamente cómo es posible obtener un Hamiltoniano de referencia efectivo  $\hat{H}_0(t)$  que contiene al término de compresión que cancela  $\hat{H}_1(t)$ . Esta idea proviene naturalmente de los estudios de campos de cavidad no estacionarios en los que ocurre el efecto Casimir dinámico.

### III. EFECTO CASIMIR DINÁMICO

#### A. Enfoque de Hamiltoniano efectivo

El ECD, un nombre introducido por Schwinger [38], fue predicho por Moore en 1970 [3]. Sin embargo, la teoría original no contaba con un Hamiltoniano, por lo que durante muchos años el ECD se estudió en la representación de Heisenberg. No fue sino hasta 1994 que C. K. Law derivó un Hamiltoniano efectivo para el ECD, permitiendo una descripción equivalente en la representación (imagen) de Schrödinger [39]. Las características esenciales del ECD, como la generación de fotones de vacío, están capturadas por la versión de un solo modo de dicho Hamiltoniano efectivo, que es el Hamiltoniano del oscilador armónico dependiente del

tiempo [1, 2]. A continuación, mostramos los pasos básicos para obtener el Hamiltoniano efectivo de un solo modo del oscilador dependiente del tiempo.

Primero, necesitamos la representación de Heisenberg para los operadores escalera instantáneos. Reemplazamos en (16) la representación de Heisenberg de los operadores de posición y momento, es decir,  $\hat{a}_{\mathbb{H}} \equiv [\omega(t) \hat{x}_{\mathbb{H}} + i \hat{p}_{\mathbb{H}}]/\sqrt{2\omega(t)}$ , donde el subíndice  $\mathbb{H}$  en  $\hat{x}_{\mathbb{H}}$  y  $\hat{p}_{\mathbb{H}}$  indica que estos están en la imagen de Heisenberg. En segundo lugar, tomamos la derivada temporal

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{a}_{\mathbb{H}}}{dt} &= \frac{1}{\sqrt{2\omega(t)}} \left[ \omega(t) \frac{d\hat{x}_{\mathbb{H}}}{dt} + i \frac{d\hat{p}_{\mathbb{H}}}{dt} \right] \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2\omega(t)}} \frac{d\omega(t)}{dt} \hat{x}_{\mathbb{H}} \\ &\quad - \frac{1}{[2\omega(t)]^{3/2}} \frac{d\omega(t)}{dt} [\omega(t) \hat{x}_{\mathbb{H}} + i \hat{p}_{\mathbb{H}}], \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\omega(t)}} [\omega(t) \hat{p}_{\mathbb{H}} - i \omega^2(t) \hat{x}_{\mathbb{H}}] \\ &\quad + \frac{1}{[2\omega(t)]^{3/2}} \frac{d\omega(t)}{dt} [\omega(t) \hat{x}_{\mathbb{H}} - i \hat{p}_{\mathbb{H}}], \\ &= -i \omega(t) \hat{a}_{\mathbb{H}} + \frac{1}{2\omega(t)} \frac{d\omega(t)}{dt} \hat{a}_{\mathbb{H}}^\dagger. \end{aligned} \tag{19}$$

De la misma manera,

$$\frac{d\hat{a}_{\mathbb{H}}^\dagger}{dt} = +i \omega(t) \hat{a}_{\mathbb{H}}^\dagger + \frac{1}{2\omega(t)} \frac{d\omega(t)}{dt} \hat{a}_{\mathbb{H}}. \tag{20}$$

Para obtener (19) y (20) hemos sustituido las ecuaciones de movimiento correspondientes para los operadores de posición y momento  $d\hat{x}_{\mathbb{H}}/dt = \hat{p}_{\mathbb{H}}$  y  $d\hat{p}_{\mathbb{H}}/dt = -\omega^2(t) \hat{x}_{\mathbb{H}}$ . En este punto, destacamos que las ecuaciones (19) y (20) no son, propiamente, ecuaciones de movimiento mecánico cuánticas [26]. En su lugar, las obtuvimos al derivar con respecto al tiempo la definición del operador escalera instantáneo. Sin embargo, utilizamos las ecuaciones de movimiento adecuadas de los operadores de posición y momento generadas por el Hamiltoniano del oscilador armónico dependiente del tiempo, es decir,  $\hat{H}_0(t)$  de (12) en la ecuación de Heisenberg  $d\hat{O}_{\mathbb{H}}/dt = i[\hat{H}_0(t), \hat{O}_{\mathbb{H}}]$ , donde  $\hat{O}_{\mathbb{H}}$  es un operador arbitrario en la representación de Heisenberg. Observe que, a diferencia del caso de frecuencia constante, las ecuaciones (19) y (20) muestran un término adicional debido a la dependencia explícita del tiempo de los operadores escalera (16).

En segundo lugar, para entender la idea de cómo funciona el enfoque de Hamiltonianos efectivos, lo ilustramos con el caso de frecuencia constante. Si  $\omega(t) \rightarrow \omega_0$ ,  $d\hat{a}_{\mathbb{H}}/dt = -i \omega_0 \hat{a}_{\mathbb{H}}$

y  $d\hat{a}_{\text{H}}^\dagger/dt = i\omega_0\hat{a}_{\text{H}}^\dagger$ . Suponiendo que por alguna razón solo se nos proporciona la información de estas ecuaciones en lugar del Hamiltoniano en sí. La pregunta crucial es, ¿qué Hamiltoniano en la representación de Schrödinger puede generar las ecuaciones anteriores? Si tal Hamiltoniano existe, las ecuaciones proporcionadas pueden interpretarse como ecuaciones de movimiento cuánticas adecuadas. Para este caso simple, es fácil ver que  $\hat{H}_{\text{eff}} = \omega_0\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0$  realiza la tarea deseada ya que  $[\hat{H}_{\text{eff}}, \hat{a}_0] = -\omega_0\hat{a}_0$ .

Ahora, para un control de frecuencia arbitrario  $\omega(t)$  y observando que  $[\hat{a}_0^{\dagger 2}, \hat{a}_0] = -2\hat{a}_0^\dagger$ , no es difícil mostrar que el Hamiltoniano efectivo,

$$\hat{H}_{\text{eff}}(t) = \omega(t)\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0 + i\frac{1}{4\omega(t)}\frac{d\omega(t)}{dt}(\hat{a}_0^{\dagger 2} - \hat{a}_0^2), \quad (21)$$

de hecho genera las ecuaciones (19) and (20) [1]. Este Hamiltoniano efectivo, derivado por primera vez hace casi tres décadas en el contexto del EDC, describe una cavidad electromagnética con un espejo móvil, donde su frecuencia está dada por  $\omega(t) = \pi/q(t)$  y  $q(t)$  es la trayectoria prescrita del espejo [39]. El Hamiltoniano de [39] muestra términos adicionales que contabilizan una interacción entre modos inducida por las condiciones de frontera del campo no estacionario. Sin embargo, estudios posteriores [40–45] muestran que cuando el campo de cavidad no estacionario soporta un solo modo, (21) se puede considerar de manera segura como la versión más simple donde se puede manifestar el Efecto Casimir Dinámico (ECD). Por ejemplo, bajo las condiciones resonantes  $\omega(t) = \omega_0[1 + \varepsilon \sin(2\omega_0 t)]$ , (21) predice un crecimiento exponencial de fotones [42–44]

$$\langle 0 | \hat{U}^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{U} | 0 \rangle = \sinh^2(\varepsilon\omega_0 t/2), \quad (22)$$

donde  $\hat{U}$  es el operador de evolución temporal correspondiente de  $\hat{H}_{\text{eff}}(t)$ ,  $\hat{a}_0|0\rangle = 0$  define el estado de vacío, y  $\varepsilon \ll 1$  es una modulación de amplitud pequeña. La ecuación (22) es conocida como la radiación de Casimir o radiación de vacío, y es consecuencia de las condiciones de contorno no adiabáticas del campo representadas por el segundo término de (21).

Es notable que, al reemplazar  $\hat{H}_0(t)$  por su Hamiltoniano efectivo físicamente equivalente  $\hat{H}_{\text{eff}}(t)$  en la definición de  $\hat{H}(t)$ , es decir,  $\hat{H}(t) = \hat{H}_{\text{eff}}(t) + \hat{H}_1(t)$ , obtenemos

$$\hat{H}(t) = \omega(t)\hat{a}_0^\dagger\hat{a}_0. \quad (23)$$

Esta ecuación muestra, de manera clara y precisa, que la dinámica de tiempo finito generada por el atajo a la adiabaticidad es, en efecto, la que está dada por el oscilador

armónico cuántico con una frecuencia instantánea  $\omega(t)$ . Dado que el término contradiabático  $\hat{H}_1(t) = -i\dot{\omega}(t)(\hat{a}_0^{\dagger 2} - \hat{a}_0^2)/4\omega(t)$  cancela el término de compresión no adiabático inducido en (21), el operador de evolución temporal será  $\hat{U} = \exp[-i \int dt' \omega(t') \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0]$ , lo cual implica que  $\langle 0 | \hat{U}^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \hat{U} | 0 \rangle = 0$ . Por lo tanto, sin importar qué tipo de modulación de frecuencia se utilice, la generación de fotones de vacío es imposible al realizar un atajo a la adiabaticidad. Cabe destacar que, desde un enfoque diferente, una conclusión similar fue obtenida recientemente aprovechando la simetría conformal del sistema [46]; ver también [47].

Al usar (23) es fácil escribir la energía final,  $\langle \hat{H}(t_f) \rangle = \omega_f \langle \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \rangle$ , en términos de la energía inicial  $\langle \hat{H}(t_0) \rangle$  como

$$\langle \hat{H}(t_f) \rangle = (\omega_f / \omega_0) \langle \hat{H}(t_0) \rangle. \quad (24)$$

La expresión de arriba es un resultado común que se encuentra en el límite adiabático de sistemas con simetría dinámica de invariancia de escala, donde  $(\omega_0 / \omega_f)^{1/2}$  se conoce como el factor de escala adiabático [48, 49]. Sin embargo, debido a que (23) contiene el uso de un STA, es decir,  $\hat{H}(t) = \hat{H}_{\text{eff}}(t) + \hat{H}_1(t)$ , la relación entre las energías inicial y final es válida para cualquier protocolo físico unitario de tiempo finito que fuerce  $\hat{H}_{\text{eff}}(t)$  a través de  $\omega(t)$  y no solo para la aproximación adiabática. Ciertamente,  $\hat{H}(t)$  sigue estrictamente la solución adiabática del Hamiltoniano de referencia  $\hat{H}_0(t)$  pero en un tiempo finito. Una consecuencia inmediata de este resultado se encuentra en la termodinámica cuántica de tiempos finitos [9]. Por ejemplo, podemos elegir  $\hat{H}(t)$  como el Hamiltoniano dependiente del tiempo asociado con la sustancia de trabajo de un motor térmico cuántico [50, 51]. Cuando la cavidad no estacionaria sufre una expansión (compresión), la longitud de la cavidad aumenta (disminuye) y la frecuencia disminuye (aumenta), lo que termina con una energía interna más baja (alta) (24). Este comportamiento se asemeja al encontrado con un pistón termodinámico. Cabe señalar que la situación previamente discutida no es evidente cuando se utilizan las expresiones estándar de  $\hat{H}(t)$  mostradas en (15) o (17).

Aunque el término contradiabático  $\hat{H}_1(t)$  típicamente desaparece al inicio ( $t_0$ ) y al final ( $t_f$ ) de un STA, obtener una relación entre las energías inicial y final utilizando (17) no es directo. Esto se debe a que el Hamiltoniano inicial (final)  $\hat{H}(t)$  depende de los operadores instantáneos al tiempo  $t = t_0 (t_f)$ . Por el contrario,  $\hat{H}(t)$  en (23) siempre está escrito en términos de operadores a un momento específico, nosotros usamos  $t_0$  pero el resultado se mantiene válido para otros momentos de tiempo.

## B. Implicaciones termodinámicas cuánticas

El ciclo cuántico de Otto opera entre dos reservorios, uno caliente y uno frío, y es un ciclo termodinámico paradigmático ampliamente utilizado por la comunidad de termodinámica cuántica [52, 53]. El ciclo consta de cuatro fases: dos fases adiabáticas (isentrópicas) en las que la sustancia de trabajo (la cavidad no estacionaria en nuestro caso) sufre una compresión y expansión mientras está aislada de los reservorios de calor; y dos fases cuánticas isocóricas en las que el sistema se pone en contacto con un reservorio, aquí la frecuencia de la cavidad tiene valores fijos y ocurre transferencia de calor (termalización), pero no se realiza trabajo. Durante la fase de compresión, la frecuencia de la cavidad,  $\omega(t)$ , aumenta desde un valor inicial  $\omega_1$  hasta  $\omega_2$ , mientras que en el proceso de expansión, esta va desde  $\omega_2$  a  $\omega_1$ . Durante la fase isocórica caliente (fría), la cavidad se relaja a un estado térmico con temperatura  $T_h$  ( $T_c$ ).

Para el estado térmico  $\hat{\rho}_{\text{th}} = \exp(-\hbar\omega_j \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 / k_B T) Z^{-1}$ , donde  $Z$  es la función de partición, el número promedio de fotones es  $\langle \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 \rangle = \text{tr}\{\hat{\rho}_{\text{th}} \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0\} = \frac{1}{2} \coth(\hbar\omega_j / 2k_B T) - 1/2$ . Con esto y con la ayuda de (24), podemos calcular las energías promedio  $\langle \hat{H}(t) \rangle$  de la cavidad no estacionaria en cada una de las fases del ciclo de Otto. Dado que usamos un STA, estos valores coinciden con los obtenidos durante el proceso adiabático lento [50]. El trabajo promedio  $\langle W \rangle$ , calculado como  $\text{tr}\{\hat{\rho} \Delta \hat{H}\}$  con  $\Delta \hat{H}$  siendo el cambio en el Hamiltoniano [19], durante las fases de compresión y expansión es  $\langle W \rangle_{\text{comp}} = \frac{\hbar}{2}(\omega_2 - \omega_1) \coth(\hbar\omega_1 / 2k_B T_c)$  y  $\langle W \rangle_{\text{exp}} = \frac{\hbar}{2}(\omega_1 - \omega_2) \coth(\hbar\omega_2 / 2k_B T_h)$ , respectivamente. Luego, el trabajo total por ciclo (de tiempo finito),  $\langle W \rangle_{\text{comp}} + \langle W \rangle_{\text{exp}}$ , es igual al trabajo de salida en el ciclo adiabático lento. Este resultado esperado confirma que hemos utilizado un STA en el ciclo termodinámico. Al calcular la eficiencia correspondiente del motor, sin el costo del STA, se obtiene el valor máximo posible  $\eta = 1 - \omega_1/\omega_2$  a potencia finita [17]. Por supuesto, para ser justos con el ciclo adiabático lento, aún debemos considerar el costo termodinámico de implementar el atajo [17–21, 54]. Sin embargo, todavía hay un debate en curso sobre cómo calcular correctamente este costo y, tan importante como eso, cómo incorporarlo en la eficiencia del motor, véase [14]. Interesantemente, cualquier propuesta que desee utilizar el término contradiabático  $\hat{H}_1(t)$  para calcular el costo del STA nos dirá que el costo energético de producir fotones de vacío está relacionado con el costo del atajo, ya que  $\hat{H}_1(t)$  es el mismo que el término de compresión del efecto Casimir dinámico.

#### IV. CONCLUSIONES

Mostramos que, con el enfoque de Hamiltoniano efectivo de la óptica cuántica, se puede identificar rápidamente que el término contradiabático de un atajo a la adiabaticidad asociado con el oscilador armónico cuántico dependiente del tiempo es igual (con el signo opuesto) al término de compresión inherente al efecto Casimir dinámico. Exhibimos el combate entre la evolución no adiabática generada por el ECD y el STA, siendo este último el que intenta imponer una dinámica adiabática en todo momento. Confirmamos la equivalencia entre los rendimientos de trabajo adiabático y no adiabático al usar un STA en un ciclo termodinámico cuántico. También mostramos que el costo energético de producir fotones de vacío puede relacionarse con el costo del atajo. Dado que principalmente trabajamos con operadores escalera, estos resultados pueden ser difíciles de obtener solo con los operadores de posición y momento, que son predominantes en la literatura de STA. Finalmente, sería interesante explorar otros Hamiltonianos contradiabáticos, que se cree que son difíciles de implementar, y buscar su contraparte en el Hamiltoniano efectivo, y viceversa.

---

- [1] Viktor Dodonov, “Fifty years of the dynamical Casimir effect,” *Physics* **2**, 67–104 (2020).
- [2] V V Dodonov, “Current status of the dynamical Casimir effect,” *Physica Scripta* **82**, 038105 (2010).
- [3] Gerald T. Moore, “Quantum theory of the electromagnetic field in a variable-length one-dimensional cavity,” *Journal of Mathematical Physics* **11**, 2679–2691 (1970).
- [4] C. M. Wilson, G. Johansson, A. Pourkabirian, M. Simoen, J. R. Johansson, T. Duty, F. Nori, and P. Delsing, “Observation of the dynamical Casimir effect in a superconducting circuit,” *Nature* **479**, 376–379 (2011).
- [5] Pasi Lähteenmäki, G. S. Paraoanu, Juha Hassel, and Pertti J. Hakonen, “Dynamical Casimir effect in a Josephson metamaterial,” *Proceedings of the National Academy of Sciences* **110**, 4234–4238 (2013).
- [6] P. D. Nation, J. R. Johansson, M. P. Blencowe, and Franco Nori, “Colloquium: Stimulating uncertainty: Amplifying the quantum vacuum with superconducting circuits,” *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1–24 (2012).

- [7] George Palasantzas, Mehdi Sedighi, and Vitaly B. Svetovoy, “Applications of Casimir forces: Nanoscale actuation and adhesion,” *Applied Physics Letters* **117** (2020).
- [8] Tao Gong, Matthew R. Corrado, Ahmed R. Mahbub, Calum Shelden, and Jeremy N. Munday, “Recent progress in engineering the Casimir effect—applications to nanophotonics, nanomechanics, and chemistry,” *Nanophotonics* **10**, 523–536 (2021).
- [9] Bjarne Andresen and Peter Salamon, “Future perspectives of finite-time thermodynamics,” *Entropy* **24** (2022).
- [10] A V Dodonov, D Valente, and T Werlang, “Quantum power boost in a nonstationary cavity-qed quantum heat engine,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **51**, 365302 (2018).
- [11] Zhaoyu Fei, Jingning Zhang, Rui Pan, Tian Qiu, and H. T. Quan, “Quantum work distributions associated with the dynamical casimir effect,” *Phys. Rev. A* **99**, 052508 (2019).
- [12] Nahuel Freitas and Juan Pablo Paz, “Fundamental limits for cooling of linear quantum refrigerators,” *Phys. Rev. E* **95**, 012146 (2017).
- [13] Giuliano Benenti and Giuliano Strini, “Dynamical Casimir effect and minimal temperature in quantum thermodynamics,” *Phys. Rev. A* **91**, 020502 (2015).
- [14] D. Guéry-Odelin, A. Ruschhaupt, A. Kiely, E. Torrontegui, S. Martínez-Garaot, and J. G. Muga, “Shortcuts to adiabaticity: Concepts, methods, and applications,” *Rev. Mod. Phys.* **91**, 045001 (2019).
- [15] Erik Torrontegui, Sara Ibáñez, Sofia Martínez-Garaot, Michele Modugno, Adolfo del Campo, David Guéry-Odelin, Andreas Ruschhaupt, Xi Chen, and Juan Gonzalo Muga, “Chapter 2 - shortcuts to adiabaticity,” in *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics*, Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics, Vol. 62, edited by Ennio Arimondo, Paul R. Berman, and Chun C. Lin (Academic Press, 2013) pp. 117–169.
- [16] Adolfo del Campo and Kihwan Kim, “Focus on shortcuts to adiabaticity,” *New Journal of Physics* **21**, 050201 (2019).
- [17] A. del Campo, J. Goold, and M. Paternostro, “More bang for your buck: Super-adiabatic quantum engines,” *Scientific Reports* **4**, 6208 (2014).
- [18] Obinna Abah and Eric Lutz, “Performance of shortcut-to-adiabaticity quantum engines,” *Phys. Rev. E* **98**, 032121 (2018).

- [19] Barış Çakmak and Özgür E. Müstecaplıoğlu, “Spin quantum heat engines with shortcuts to adiabaticity,” *Phys. Rev. E* **99**, 032108 (2019).
- [20] Obinna Abah and Mauro Paternostro, “Shortcut-to-adiabaticity Otto engine: A twist to finite-time thermodynamics,” *Phys. Rev. E* **99**, 022110 (2019).
- [21] Obinna Abah, Mauro Paternostro, and Eric Lutz, “Shortcut-to-adiabaticity quantum Otto refrigerator,” *Phys. Rev. Res.* **2**, 023120 (2020).
- [22] Tova Feldmann and Ronnie Kosloff, “Quantum lubrication: Suppression of friction in a first-principles four-stroke heat engine,” *Phys. Rev. E* **73**, 025107 (2006).
- [23] J G Muga, X Chen, S Ibáñez, I Lizuain, and A Ruschhaupt, “Transitionless quantum drivings for the harmonic oscillator,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **43**, 085509 (2010).
- [24] M V Berry, “Transitionless quantum driving,” *J. Phys. A Math. Theor.* **42**, 365303 (2009).
- [25] Ralf Schützhold, Günter Plunien, and Gerhard Soff, “Trembling cavities in the canonical approach,” *Phys. Rev. A* **57**, 2311–2318 (1998).
- [26] J. J. Sakurai and Jim Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, 3rd ed. (Cambridge University Press, 2020).
- [27] Christopher Gerry and Peter Knight, *Introductory Quantum Optics* (Cambridge University Press, 2004).
- [28] Girish S Agarwal, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, 2012).
- [29] Andrei B Klimov and Sergei M Chumakov, *A Group-theoretical Approach to Quantum Optics: Models of Atom-Field Interactions* (John Wiley & Sons, 2009).
- [30] Héctor Moya-Cessa and Manuel Fernández Guasti, “Coherent states for the time dependent harmonic oscillator: the step function,” *Phys. Lett. A* **311**, 1–5 (2003).
- [31] M. Fernández Guasti and H Moya-Cessa, “Solution of the Schrödinger equation for time-dependent 1D harmonic oscillators using the orthogonal functions invariant,” *Journal of Physics A: Mathematical and General* **36**, 2069–2076 (2003).
- [32] H R Lewis, “Classical and quantum systems with time-dependent harmonic-oscillator-type hamiltonians,” *Phys. Rev. Lett.* **18**, 510–512 (1967).
- [33] I.A. Malkin and V.I. Man’ko, “Coherent states and excitation of N-dimensional non-stationary forced oscillator,” *Physics Letters A* **32**, 243–244 (1970).

- [34] S. Ibáñez, Xi Chen, E. Torrontegui, J. G. Muga, and A. Ruschhaupt, “Multiple Schrödinger pictures and dynamics in shortcuts to adiabaticity,” *Phys. Rev. Lett.* **109**, 100403 (2012).
- [35] Natalia Sánchez-Kuntz, Álvaro Parra-López, Mireia Tolosa-Simeón, Tobias Haas, and Stefan Floerchinger, “Scalar quantum fields in cosmologies with  $2 + 1$  spacetime dimensions,” *Phys. Rev. D* **105**, 105020 (2022).
- [36] Mireia Tolosa-Simeón, Álvaro Parra-López, Natalia Sánchez-Kuntz, Tobias Haas, Celia Viermann, Marius Sparn, Nikolas Liebster, Maurus Hans, Elinor Kath, Helmut Strobel, Markus K. Oberthaler, and Stefan Floerchinger, “Curved and expanding spacetime geometries in bose-einstein condensates,” *Phys. Rev. A* **106**, 033313 (2022).
- [37] R. Román-Ancheyta, M. Berrondo, and J. Récamier, “Parametric oscillator in a Kerr medium: evolution of coherent states,” *J. Opt. Soc. Am. B* **32**, 1651–1655 (2015).
- [38] J. Schwinger, “Casimir energy for dielectrics.” *Proceedings of the National Academy of Sciences* **89**, 4091–4093 (1992).
- [39] C. K. Law, “Effective Hamiltonian for the radiation in a cavity with a moving mirror and a time-varying dielectric medium,” *Phys. Rev. A* **49**, 433–437 (1994).
- [40] A. V. Dodonov and V. V. Dodonov, “Dynamical Casimir effect via modulated Kerr or higher-order nonlinearities,” *Phys. Rev. A* **105**, 013709 (2022).
- [41] R. Román-Ancheyta, O. de los Santos-Sánchez, and C. González-Gutiérrez, “Damped Casimir radiation and photon correlation measurements,” *J. Opt. Soc. Am. B* **35**, 523–527 (2018).
- [42] Ricardo Román-Ancheyta, Irán Ramos-Prieto, Armando Perez-Leija, Kurt Busch, and Roberto J. de León-Montiel, “Dynamical Casimir effect in stochastic systems: Photon harvesting through noise,” *Phys. Rev. A* **96**, 032501 (2017).
- [43] R. Román-Ancheyta, C. González-Gutiérrez, and J. Récamier, “Influence of the Kerr nonlinearity in a single nonstationary cavity mode,” *J. Opt. Soc. Am. B* **34**, 1170–1176 (2017).
- [44] A V Dodonov and V V Dodonov, “Photon statistics in the dynamical Casimir effect modified by a harmonic oscillator detector,” *Physica Scripta* **2013**, 014017 (2013).
- [45] A. V. Dodonov and V. V. Dodonov, “Approximate analytical results on the cavity dynamical Casimir effect in the presence of a two-level atom,” *Phys. Rev. A* **85**, 015805 (2012).
- [46] Nicolás F. Del Grosso, Fernando C. Lombardo, Francisco D. Mazzitelli, and Paula I. Villar, “Shortcut to adiabaticity in a cavity with a moving mirror,” *Phys. Rev. A* **105**, 052217 (2022).

- [47] M P Silveri, J A Tuorila, E V Thuneberg, and G S Paraoanu, “Quantum systems under frequency modulation,” *Reports on Progress in Physics* **80**, 056002 (2017).
- [48] J Jaramillo, M Beau, and A del Campo, “Quantum supremacy of many-particle thermal machines,” *New Journal of Physics* **18**, 75019 (2016).
- [49] Adolfo del Campo, Aurélia Chenu, Shujin Deng, and Haibin Wu, “Friction-free quantum machines,” in *Thermodynamics in the Quantum Regime: Fundamental Aspects and New Directions*, edited by Felix Binder, Luis A. Correa, Christian Gogolin, Janet Anders, and Gerardo Adesso (Springer International Publishing, Cham, 2018) pp. 127–148.
- [50] O. Abah, J. Roßnagel, G. Jacob, S. Deffner, F. Schmidt-Kaler, K. Singer, and E. Lutz, “Single-ion heat engine at maximum power,” *Phys. Rev. Lett.* **109**, 203006 (2012).
- [51] Johannes Roßnagel, Samuel T Dawkins, Karl N Tolazzi, Obinna Abah, Eric Lutz, Ferdinand Schmidt-Kaler, and Kilian Singer, “A single-atom heat engine,” *Science* **352**, 325–329 (2016).
- [52] H. T. Quan, Yu-xi Liu, C. P. Sun, and Franco Nori, “Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines,” *Phys. Rev. E* **76**, 031105 (2007).
- [53] Ronnie Kosloff and Yair Rezek, “The quantum harmonic Otto cycle,” *Entropy* **19** (2017), [10.3390/e19040136](https://doi.org/10.3390/e19040136).
- [54] Qiongyuan Wu, Mario A. Ciampini, Mauro Paternostro, and Matteo Carlesso, “Quantifying protocol efficiency: A thermodynamic figure of merit for classical and quantum state-transfer protocols,” *Phys. Rev. Res.* **5**, 023117 (2023).

# Optimización de sistemas Astrofísicos y Cosmológicos con Redes Neuronales Físicamente Informadas

Juan de Dios Rojas Olvera<sup>1</sup> and J. Alberto Vazquez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Astronomía, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

<sup>2</sup>Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, 62210, Cuernavaca, Morelos, México.

## 1. Introducción

En las últimas décadas, la cosmología observacional y el aprendizaje profundo han crecido significativamente. En cosmología, nuevas misiones espaciales y observatorios buscan resolver enigmas como la naturaleza de la energía oscura y la tensión de Hubble. Simultáneamente, el aprendizaje profundo ha revolucionado campos como la visión por computadora y el procesamiento del lenguaje natural, mostrando ser una herramienta clave para analizar los vastos datos generados por proyectos como el Vera C. Rubin, el Square Kilometre Array y el satélite Euclid [15, 19].

El aprendizaje profundo ha demostrado su utilidad en problemas de clasificación, simulaciones de N-cuerpos [7, 9], inferencia estadística [17], y reconstrucción de funciones [12], entre otros. En particular, las Redes Neuronales Físicamente Informadas (**PINN**, por sus siglas en inglés) ofrecen una alternativa prometedora a los métodos numéricos tradicionales, permitiendo resolver ecuaciones diferenciales e integrales combinando datos observacionales con información matemática [32, 30, 8].

A diferencia de los perceptrones multicapa (MLP), las PINN no requieren soluciones precálculadas, ya que su entrenamiento se basa en cumplir expresiones matemáticas específicas, lo que las convierte en una técnica de aprendizaje no supervisado. Además, las PINN tienen ventajas sobre los MLP al evitar el sobreajuste y proporcionar un marco continuo que permite derivarlas, integrarlas y evaluarlas repetidamente [4, 18].

En cosmología y astrofísica, las PINN son especialmente útiles para la delimitación de parámetros, ofreciendo un método eficiente para resolver sistemas complejos en la inferencia de parámetros cosmológicos, reemplazando técnicas tradicionales como las cadenas de Markov (MCMC) [18, 14], como lo veremos a lo largo de este trabajo.<sup>1</sup>

## 2. Modelos Cosmológicos

### 2.1. Modelo $\Lambda$ -CDM

Aunque las soluciones a las ecuaciones de Einstein permitían un universo en expansión, esta idea ganó relevancia hasta 1929, cuando Edwin Hubble observó nebulosas extragalácticas y mostró que el universo se encuentra en expansión [16]. Este hecho marcó el nacimiento de la cosmología moderna como una ciencia observacional.

El modelo cosmológico estándar, conocido como  $\Lambda$ -Cold Dark Matter ( $\Lambda$ -CDM), destaca por su simplicidad y su capacidad para describir observaciones cosmológicas clave:

- **Fondo Cósmico de Microondas (CMB):** Predice con precisión la anisotropía del CMB, según datos del satélite Planck [34].

<sup>1</sup>Gran parte de este trabajo se basa en la tesis de Maestría: "Optimización de sistemas Astrofísicos y Cosmológicos con Redes Neuronales Físicamente Informadas".

- **Abundancia de elementos ligeros:** Explica las proporciones de D,  $^4\text{He}$  y  $^7\text{Li}$  [38].
- **Estructura a gran escala:** Sus parámetros concuerdan con el espectro de potencia angular del CMB y las distribuciones espaciales de galaxias [1].
- **Expansión acelerada:** Describe la expansión acelerada observada en supernovas tipo Ia [36].
- **Lente gravitatoria:** Explica la distorsión de luz por objetos masivos [3].

## 2.2. Componentes del Universo

El modelo  $\Lambda$ -CDM considera las siguientes componentes:

- **Materia bariónica:** Formada por protones, neutrones y electrones.
- **Radiación  $\rho_r$ :** Incluye partículas relativistas como fotones y neutrinos.
- **Materia oscura fría:** Materia no relativista que interactúa solo gravitacionalmente [24, pp. 63–73].
- **Constante cosmológica  $\rho_\Lambda$ :** Representa la energía oscura responsable de la expansión acelerada.

El contenido del universo se describe como la suma de densidades  $\rho = \sum_i \rho_i$ . Cada componente obedece una ecuación de estado barotrópica:

$$p_i = (\gamma_i - 1)\rho_i, \quad (1)$$

donde  $\gamma_r = 4/3$ ,  $\gamma_m = 1$  y  $\gamma_\Lambda = 0$ . La evolución de las densidades es:

$$\rho_m = \rho_{m,0} a^{-3}, \quad (2)$$

$$\rho_r = \rho_{r,0} a^{-4}, \quad (3)$$

$$\rho_\Lambda = \rho_{\Lambda,0}. \quad (4)$$

En términos del corrimiento al rojo  $z$ , la ecuación de Friedmann parametrizada es:

$$\frac{H^2}{H_0^2} = \Omega_{r,0}(1+z)^4 + \Omega_{m,0}(1+z)^3 + (1-\Omega_0)(1+z)^2 + \Omega_{\Lambda,0}. \quad (5)$$

En el modelo  $\Lambda$ -CDM estándar, se desprecia la radiación debido a su irrelevancia en épocas tardías. Asumiendo un universo plano, la ecuación se simplifica a:

$$H = H_0 \sqrt{\Omega_{m,0}(1+z)^3 + \Omega_{\Lambda,0}}, \quad (6)$$

donde  $\Omega_{m,0}$  y  $\Omega_{\Lambda,0}$  son los parámetros de densidad actuales. Para  $z = 0$ , la ecuación se puede reescribir como:

$$1 = \Omega_{m,0} + \Omega_{\Lambda,0}. \quad (7)$$

Finalmente, la evolución de  $\Omega_m(z)$  está definida por:

$$\frac{dx}{dz} - \frac{3x}{z+1} = 0, \quad (8)$$

con  $x = \Omega_m$  y la condición inicial  $x_0 = \Omega_{m,0}$ .

### 2.3. Energía oscura paramétrica

El marco del modelo cosmológico estándar permite atribuir la expansión acelerada del universo a la contribución de la energía oscura. Lo anterior es un problema, pues aún se ignora mucho sobre la naturaleza de la componente principal del cosmos, con casi 70 % [22, 23] de la contribución energética y que determina la dinámica del universo.

Al tratarse a la energía oscura como un fluido representado por la constante cosmológica  $\Lambda$ , una primera aproximación fuera del modelo estándar es asumir que si dicho fluido es dinámico, su ecuación de estado,  $\omega$ , no debería ser constante y, por ende, esta evolucionará con el tiempo cósmico, o en función de  $z$  [27]. Este comportamiento se puede expresar con la relación:

$$\omega(z) = \frac{p(z)}{\rho(z)}. \quad (9)$$

Dicho lo anterior, es posible proponer distintas parametrizaciones de la ecuación de estado  $\omega(z)$ , que dependerán de una serie de parámetros que luego podrán ser inferidos a partir de las observaciones. Se han propuesto muchos modelos para  $\omega(z)$ , siempre intentando que estos permitan extraer la mayor información relevante de los datos y teniendo en cuenta en todo momento que estos modelos no provienen de una teoría fundamental. Posiblemente, la parametrización más conocida sea la propuesta por Chevallier-Polarski-Linder (CPL) [10] y por [25] de manera independiente en 2005, cuya ecuación de estado se define en la expresión:

$$\omega = \omega_0 + \omega_a \frac{z}{1+z}. \quad (10)$$

Donde  $\omega_0$  y  $\omega_a$  son los parámetros libres a ser delimitados. La popularidad de esta parametrización radica en varios puntos: el primero es su sencillez, pues solo depende de dos parámetros libres, de los cuales además se cuenta con una interpretación física natural;  $\omega_0$  es el valor de la ecuación de estado a  $z = 0$ , es decir, medida al día de hoy; y  $\omega_a$  determina el comportamiento para grandes corrimientos al rojo. Cabe resaltar que la ecuación 10 está bien definida cuando el corrimiento al rojo tiende a infinito. También se ha probado [26] una relación entre la ecuación de estado global  $\omega$  y  $\omega_a$ , dada por la ecuación:

$$\omega_a = -2\omega'|_{z=1}, \quad (11)$$

$$\text{con } \omega' = \frac{d}{d \ln(a)} \omega.$$

La parametrización CPL es particularmente útil para describir el comportamiento de la energía oscura en tiempos cosmológicos tardíos, donde tiene mayor relevancia, y es insignificante en épocas tempranas. Aunque estudios previos, como los de [27] utilizando datos de SNIa, han demostrado que CPL no es la parametrización que proporciona la mayor cantidad de información sobre  $\omega(z)$ , sus características positivas la convierten en una extensión apropiada del modelo estándar, razón por la cual fue adoptada en este trabajo.

En el modelo estándar, la parametrización de la energía oscura se asume constante, resultando en la evolución de  $\omega_\Lambda$ . En el marco CPL, al sustituir la ecuación 9 en la ecuación de continuidad, se obtiene la evolución descrita por:

$$\frac{d\rho_\Lambda}{dz} - \frac{3\rho_\Lambda}{1+z} \left( 1 + \omega_0 + \frac{\omega_a z}{1+z} \right) = 0. \quad (12)$$

Integrando, se obtiene la densidad de energía oscura:

$$\rho_\Lambda = \rho_{\Lambda,0}(1+z)^{3(1+\omega_0+\omega_a)} \exp\left(-\frac{3\omega_a z}{1+z}\right). \quad (13)$$

En un universo plano, ignorando la contribución de la radiación, la ecuación de Friedmann en el marco CPL toma la forma:

$$H(z) = H_0 \sqrt{\Omega_{m,0}(1+z)^3 + \Omega_{\Lambda,0}(1+z)^{3(1+\omega_0+\omega_a)} \exp\left(-\frac{3\omega_a z}{1+z}\right)}. \quad (14)$$

Dada esta expresión, la distancia comóvil se calcula integrando:

$$d_C = \frac{1}{H_0} \int_0^z \frac{dz'}{\sqrt{\Omega_{m,0}(1+z')^3 + \Omega_{\Lambda,0}(1+z')^{3(1+\omega_0+\omega_a)} \exp\left(-\frac{3\omega_a z'}{1+z'}\right)}}. \quad (15)$$

Como se mencionó en la sección de distancias cosmológicas, la distancia comóvil permite calcular la distancia luminosa mediante la relación:

$$d_L = (1+z)d_C. \quad (16)$$

## 2.4. Quintaesencia

El modelo de quintaesencia surge como una propuesta para explicar la expansión acelerada del universo observada por [36] mediante supernovas, y respaldada por estudios del Fondo Cósmico de Microondas [39] y las Oscilaciones Acústicas de Bariones (BAO) [13]. A diferencia del modelo estándar, donde la constante cosmológica  $\Lambda$  (con  $\omega = -1$ ) se asocia a la energía oscura, quintaesencia propone un campo escalar dinámico.

El lagrangiano asociado al campo escalar  $\phi$  es:

$$L = \frac{1}{2}\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - V(\phi), \quad (17)$$

donde  $V(\phi)$  es el potencial [5]. A partir de este lagrangiano, se obtiene la ecuación de movimiento:

$$\ddot{\phi} + 3H\dot{\phi} + \frac{\partial V}{\partial\phi} = 0. \quad (18)$$

La densidad y presión asociadas al campo escalar son:

$$\rho = \frac{1}{2}\dot{\phi}^2 + V(\phi), \quad (19)$$

$$p = \frac{1}{2}\dot{\phi}^2 - V(\phi). \quad (20)$$

Quintaesencia se caracteriza por una ecuación de estado  $\omega = p/\rho$ , y su densidad está parametrizada por  $\Omega_Q$ , relacionada con la densidad total  $\Omega_m = 1 - \Omega_Q$ . A diferencia de  $\Lambda$ , esta componente evoluciona en el tiempo, es espacialmente inhomogénea, y tiene presión negativa, permitiendo explorar escenarios más allá del modelo estándar [6].

El modelo  $Q$ -CDM incluye quintaesencia en un espacio plano con métrica FLRW, junto a las partículas y componentes del modelo  $\Lambda$ -CDM, excluyendo  $\Lambda$ . Este modelo describe un universo que evoluciona desde la inflación, pasando por etapas dominadas por radiación y materia, hasta la actual dominación de quintaesencia. Campos escalares como el escalar de Higgs o el inflatón refuerzan la relevancia de esta propuesta en la física moderna [33].

La expansión del universo en este modelo está descrita por la ecuación de Friedmann (21), donde  $\rho_m$  es la densidad de energía asociada a la materia y  $\kappa_0 = 8\pi G$  es la constante de gravitación de Einstein.

$$H^2 = \kappa_0^2 \left( \rho_m + \frac{1}{2}\dot{\phi}^2 + V \right). \quad (21)$$

La ecuación de Klein-Gordon se ha resuelto utilizando métodos numéricos basados en sistemas dinámicos, con diversos potenciales  $V$  [11]. Esto implica reformular la ecuación en un sistema acoplado mediante el cambio de variables (22):

$$x = \frac{\sqrt{\kappa_0}\dot{\phi}}{\sqrt{6}H}, \quad y = \frac{\sqrt{\kappa_0}V(\phi)}{\sqrt{3}H}. \quad (22)$$

El sistema resultante se expresa en términos de las ecuaciones (23):

$$\begin{cases} \frac{dx}{dN} = -3x + \frac{\sqrt{6}}{2}\lambda y^2 + \frac{3}{2}x(1+x^2-y^2), \\ \frac{dy}{dN} = -\frac{\sqrt{6}}{2}xy\lambda + \frac{3}{2}y(1+x^2-y^2), \end{cases} \quad (23)$$

donde  $N = \ln(a)$  y la ecuación de restricción es:

$$\frac{\kappa_0\rho_m}{3H^2} + x^2 + y^2 = 1. \quad (24)$$

El sistema requiere especificar condiciones iniciales  $\{x_0, y_0\}$ , una tarea delicada debido a su sensibilidad al valor inicial de  $\phi$  [20]. Por ejemplo, [29] utilizan el formalismo de inflación estocástica para estimar posibles valores de  $\phi_0$ . Otro enfoque es el método de disparo (*shooting*).

Por último, [40] seleccionan cuidadosamente las condiciones iniciales para lograr un comportamiento de *descongelamiento*, donde el campo escalar inicialmente está congelado en una región plana del potencial, comportándose como una constante cosmológica. Utilizan el método de disparo para estimar  $\Omega_{\phi,0}$  mediante:

$$\Omega_{\phi,0} = 1 - \sum_i \Omega_{i,0}. \quad (25)$$

El método de disparo es robusto y flexible para tratar las condiciones iniciales [2, pp.174], aunque presenta desafíos como la complejidad computacional y problemas de estabilidad numérica en ciertos casos.

### 3. Redes Neuronales Físicamente Informadas

#### 3.1. Redes Neuronales y su Entrenamiento

Las redes neuronales artificiales (ANN, por sus siglas en inglés) son modelos computacionales inspirados en el funcionamiento del cerebro humano, diseñados para procesar información y resolver problemas a través del aprendizaje. Una red neuronal consta de múltiples capas de nodos, también llamados *neuronas*, que están conectados mediante pesos ajustables. Cada nodo recibe entradas, las procesa a través de una función de activación no lineal, y genera una salida que se transmite a las neuronas de la siguiente capa. Este esquema se puede resumir en la ecuación:

$$y_i = f \left( \sum_j w_{ij}x_j + b_i \right), \quad (26)$$

donde  $y_i$  es la salida de la neurona  $i$ ,  $x_j$  son las entradas,  $w_{ij}$  son los pesos,  $b_i$  es el sesgo, y  $f$  es una función de activación como *ReLU* o *sigmoide*.

El entrenamiento de una red neuronal se realiza a través de un proceso iterativo de optimización de una función de costo. Este proceso busca minimizar la diferencia entre las predicciones de la red y las salidas reales esperadas. El entrenamiento sigue tres pasos principales:

1. **Propagación hacia adelante:** Se calculan las salidas de cada capa mediante las conexiones y funciones de activación, hasta obtener la predicción final de la red.
2. **Cálculo de la función de costo:** Se evalúa una métrica, como el error cuadrático medio (MSE) o la entropía cruzada, que mide el desempeño de la red.
3. **Propagación hacia atrás:** Usando el algoritmo de retropropagación y un optimizador como Adam, se ajustan los pesos y sesgos mediante el gradiente descendente para minimizar la función de costo.

El entrenamiento se realiza en *batches*, repitiendo estos pasos durante múltiples *épocas*, que corresponden a un recorrido completo del conjunto de datos.

### 3.2. Perceptrón Multicapa (MLP)

El Perceptrón Multicapa (MLP) es una de las arquitecturas más básicas y comunes de redes neuronales. Consiste en una capa de entrada, una o más capas ocultas, y una capa de salida. Cada capa oculta aplica transformaciones no lineales a las entradas provenientes de la capa anterior, permitiendo que el modelo aprenda representaciones complejas de los datos.

Una característica importante del MLP es su capacidad para aproximar funciones continuas gracias al teorema de aproximación universal [28], que garantiza que una red con al menos una capa oculta suficientemente grande puede aproximar cualquier función medible dentro de un rango determinado.

El entrenamiento de un MLP es supervisado, es decir, se basa en pares de datos de entrada y salida  $(X, Y)$ . Sin embargo, esta arquitectura también puede adaptarse a otros paradigmas de aprendizaje, como es el caso de las redes neuronales físicamente informadas (PINN), las cuales prescinden de las etiquetas y se entranan directamente a partir de expresiones matemáticas.

El aprendizaje profundo es un paradigma de la inteligencia artificial encargado del estudio y desarrollo de las técnicas de entrenamiento de las redes neuronales artificiales, un objeto computacional inspirado en el funcionamiento del cerebro, con capas de neuronas interconectadas que procesan información y aprenden patrones.

La propiedad fundamental de las redes neuronales es que son un aproximador universal de funciones [28] y esta habilidad se ve potenciada al utilizar distintas arquitecturas de red que cumplan con objetivos específicos. Las redes neuronales más sencillas son las conocidas como perceptrones multicapa o totalmente conectadas (fully-connected) descritas en el capítulo anterior.

El enfoque descrito anteriormente motiva el desarrollo de un tipo de red neuronal que, aunque se basa en la arquitectura de un perceptrón multicapa, incorpora información matemática relevante sobre el fenómeno que se desea modelar. Estas redes se conocen como Redes Neuronales Físicamente Informadas (PINNs, por sus siglas en inglés).

### 3.3. Modelando funciones implícitas

La idea fundamental detrás de las PINN radica en la capacidad de una red neuronal de aproximar funciones, pero a diferencia del aprendizaje supervisado mencionado en el capítulo anterior, se propone estructurar una nueva forma de aprendizaje a partir de una expresión matemática de una función dada y no necesariamente de datos, de tal manera que la red sea capaz de emular una función  $u$  inmersa en una función implícita  $\mathcal{F}$  cuya forma general está dada por la ecuación 27

$$\mathcal{F}(u, \{t_i\}, \Theta) = 0, \quad (27)$$

donde;  $\{t_i\}$  es el conjunto de variables independientes del fenómeno;  $\Theta$  representa los parámetros libres de la relación  $\mathcal{F}$ , asociados al fenómeno también; y  $u \equiv u(\{t_i\}, \Theta)$ . Así, la intención es que la red neuronal emule la función  $u$  a través de pedirle que satisfaga la relación  $\mathcal{F}$ , como en 28

$$\mathcal{F}(ANN(\{t_i\}, \Theta), \{t_i\}, \Theta) = 0. \quad (28)$$

Hacer que la red neuronal satisfaga 28 se puede lograr definiendo la función de costo 29:

$$\mathcal{L}_{\mathcal{F}} = \mathcal{F}(ANN(\{t_i\}, \Theta), \{t_i\}, \Theta)^2. \quad (29)$$

Es de mencionar que hasta aquí se sigue trabajando con la arquitectura de un MLP común y corriente, simplemente se ha definido una nueva función de costo que permite incorporar una expresión matemática de forma directa.

A partir de la expresión analítica  $\mathcal{L}_{\mathcal{F}}$ , se generan los puntos que servirán para el entrenamiento de la red (los que antes eran  $X, Y$ , pues ahora  $t_i$  es la variable independiente y  $Y$  no es necesario), siguiendo una cierta distribución (usualmente uniforme) dentro de un rango determinado para las variables  $\{t_i\}$ , donde después se continúa con la optimización de la función de costo de la misma manera que para un MLP. Es entonces este proceso de entrenamiento lo que define a una PINN y la diferencia de un MLP convencional.

Al prescindir de las etiquetas para entrenar a esta red neuronal, se tiene un caso de *aprendizaje no supervisado*. Además, en este caso el aprendizaje se obtendrá a partir de una expresión analítica por lo que los puntos que se le proveerán estarán libres de ruido o sesgo observacional (a menos que se

combine con datos observacionales como se trata en la sección 3.8). Como no hay restricciones sobre la relación  $\mathcal{F}$  más allá de satisfacer las condiciones del teorema fundamental de aproximación [28], la cantidad de funciones que se pueden emular de esta manera es considerable. Sin embargo hay un tipo en particular que es fundamental para las matemáticas y la física, el caso cuando a  $\mathcal{F}$  la definen operadores diferenciales.

### 3.4. Ecuaciones diferenciales

El caso particular más importante de función implícita se da cuando la relación  $\mathcal{F}$  describe una ecuación diferencial o sistema de ecuaciones diferenciales. Por simplicidad, primero se considerará el caso de una ecuación diferencial ordinaria (EDO), la forma más general de una EDO está dada por la ecuación 30.

$$\mathcal{F}\left(t, u, \frac{du}{dt}, \frac{d^2u}{dt^2}, \dots, \frac{d^n u}{dt^n}, \Theta\right) = 0. \quad (30)$$

Por lo que al sustituir la ecuación 30 en la 29, se obtiene la función de costo 31:

$$\mathcal{L}_{\mathcal{F}} = \mathcal{F}\left(t, ANN, \frac{dANN}{dt}, \frac{d^2ANN}{dt^2}, \dots, \frac{d^n ANN}{dt^n}, \Theta\right)^2. \quad (31)$$

Así, una vez que se ha minimizado la ecuación 31, el modelo provisto por la PINN podrá emular la solución original:  $ANN \sim u$ .

### 3.5. Condiciones iniciales y de frontera

Para que la solución de una ecuación diferencial  $\mathcal{F}$  quede completamente determinada, es necesario establecer condiciones extra a la determinada sólo por  $\mathcal{F}$ , estas son los valores de la función solución a algunos valores fijos de la(s) variables independientes. Dichas condiciones se denominan condiciones iniciales, cuya expresión general para ecuaciones de una sola variable está dada por 32.

$$\frac{d^i u}{dt^i}(t_0) - u_0^{(i)} = 0 \quad i = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (32)$$

A los sistemas de ecuaciones diferenciales que deben cumplir con condiciones iniciales como las definidas en 32 se les denomina *problemas de valor inicial*.

En términos generales la solución de un sistema de ecuaciones diferenciales está definida sobre un dominio  $\Omega \subset R^n$  es común que ciertas condiciones deban ser impuestas sobre la frontera de  $\Omega$ ,  $\partial\Omega$ . A diferencia de las condiciones iniciales, estas restricciones no se dan sólo en puntos extremos de un intervalo, sino sobre todo un intervalo que parametriza a  $\partial\Omega$ . Condiciones de este tipo se denominan *condiciones de frontera* y de forma general dependen de las derivadas parciales de la solución, como se representan en la ecuación 33

$$g\left(t_k, u, \frac{\partial^j u}{\partial t_k^j}\right)\Big|_{\partial\Omega} = 0, \quad \forall t_k \in \partial\Omega. \quad (33)$$

Dado que siempre se tendrán condiciones iniciales y muy frecuentemente se establecerán restricciones sobre la frontera del dominio, la PINN deberá ser capaz de cumplir tanto con condiciones de frontera como con condiciones iniciales. Existen dos enfoques a través de los cuales se puede forzar a la PINN a cumplir condiciones iniciales o de frontera, y serán detallados a continuación en las secciones 3.6 y 3.7.

### 3.6. Condiciones iniciales y de frontera como componentes del costo (por imposición)

Es la optimización de la función de costo lo que determina si el modelo ha aprendido o no. Por lo que es natural afirmar que si la función de costo 29 es la que construye el comportamiento global de la red, se puede añadir una componente que represente el comportamiento sobre determinados puntos o

regiones del dominio. Por lo que se definen las nuevas componentes del costo  $\mathcal{L}_{u_0}$  y  $\mathcal{L}_{\partial\Omega}$ , definidas en las ecuaciones 34 y 35 [35] que representan las contribuciones de todas las condiciones iniciales y de frontera respectivamente.

$$\mathcal{L}_{u_0} = \sum_i \left( \frac{d^i ANN}{dt^i}(t_0) - u_0^{(i)} \right)^2, \quad (34)$$

$$\mathcal{L}_{\partial\Omega} = \sum_k g \left( t_k, ANN, \frac{\partial^j ANN}{\partial t_k^j} \right)^2 \Big|_{\partial\Omega}. \quad (35)$$

Así pues cuando se intente resolver una ecuación diferencial con determinadas condiciones iniciales y de frontera se deberán considerar las contribuciones del costo dadas por la ecuación diferencial  $\mathcal{L}_F$ , las de las condiciones iniciales  $\mathcal{L}_{u_0}$  y las de las restricciones de frontera  $\mathcal{L}_{\partial\Omega}$ . Por lo tanto, la función de costo a optimizar es 36, la suma de 29, 34, 35. Cuando las condiciones del sistema se consideran de esta manera, se dice que son incluidas **por Imposición**

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_F + \mathcal{L}_{u_0} + \mathcal{L}_{\partial\Omega}. \quad (36)$$

Es importante notar que en términos generales las componentes de la función de costo 36 no dependen de las variables independientes, por ejemplo las componentes 34 y 35 son constantes respecto a dichas variables. Sin embargo, estas funciones de costo sí dependen de los parámetros de la red, por lo que es posible obtener las derivadas parciales respecto a esos parámetros y propagar el error hacia atrás como se indica en la sección 3.2.

### 3.7. Parametrización

Existe un esquema alternativo al mencionado en la sección 3.6 donde la carga de satisfacer las condiciones iniciales o de frontera recae directamente sobre la función de costo, se trata del descrito por [21]. Este enfoque se basa en asumir que se tiene una ecuación diferencial de la forma 30 que precisa de cumplir determinadas condiciones iniciales y de frontera, cuya solución puede expresarse como una función  $\Psi(t, \theta)$ , donde  $\theta$  son parámetros ajustables intrínsecos a la solución. Entonces se obtiene la ecuación diferencial 37

$$\mathcal{F} \left( t, \Psi, \frac{d\Psi}{dt}, \frac{d^2\Psi}{dt^2}, \dots, \frac{d^n\Psi}{dt^n}, \Theta \right) = 0. \quad (37)$$

No se deben confundir los parámetros  $\Theta$  y  $\theta$ : los primeros son los parámetros libres asociados al fenómeno que describe la ecuación diferencial y los segundos son los parámetros ajustables intrínsecos a la función solución, que más adelante serán los pesos y sesgos de la red neuronal. La forma en la que  $\Psi$  cumple con las condiciones iniciales y de frontera es definirla como la suma de dos funciones, como se indica en la ecuación 38

$$\Psi(t, \theta) = \phi(t) + \psi(t, ANN(t, \theta)), \quad (38)$$

donde  $\phi(t)$  satisface las condiciones iniciales o de frontera y no contiene parámetros ajustables;  $ANN(t, \theta)$  es un perceptrón multicapa, por lo que  $\theta$  son sus pesos y sesgos; y  $\psi$  se construye de tal manera que no tenga contribución en las condiciones iniciales o de frontera y su forma dependerá de cómo sean las dichas condiciones.

Es entonces la parametrización  $\Psi(t, \theta)$  de la red neuronal la que dará la solución de la ecuación diferencial y además dicha solución cumplirá las condiciones iniciales y de frontera del problema. Por lo que la red deberá ser siempre parametrizada por  $\Psi$ , incluso durante el entrenamiento, como se puede ver en la figura 1. La función de costo para el esquema de parametrización está dada entonces por la ecuación 39

$$\mathcal{L}_\Psi = \mathcal{F} \left( t, \Psi, \frac{d\Psi}{dt}, \frac{d^2\Psi}{dt^2}, \dots, \frac{d^n\Psi}{dt^n}, \Theta \right)^2. \quad (39)$$

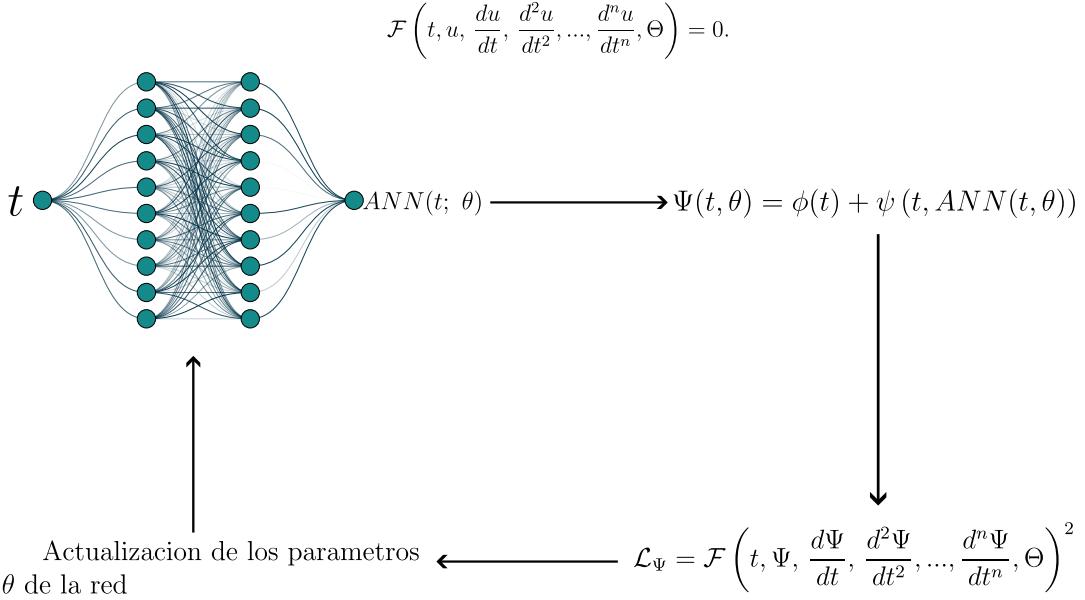


Figura 1: Proceso de entrenamiento de una PINN, asociada a un sistema de ecuaciones diferenciales cuyas condiciones serán satisfechas por el método de parametrización.  $ANN$  se parametriza por  $\Psi$  para cumplir condiciones iniciales y de frontera, luego  $\Psi$  es evaluada en el sistema de ecuaciones y se genera la función de costo  $\mathcal{L}_\Psi$  que será minimizada actualizando los parámetros  $\theta$  de la red. La solución al sistema  $\mathcal{F}$  es  $\Psi$ .

Dos de los problemas con restricciones sobre la solución del sistema son el problema de *Dirichlet* y de *Neumann*, donde las condiciones de *Dirichlet* se dan sobre la solución evaluada en el dominio y su frontera, como se indica en la ecuación 40

$$\begin{cases} \mathcal{F}\left(t, u, \frac{du}{dt}, \frac{d^2u}{dt^2}, \dots, \frac{d^nu}{dt^n}, \Theta\right) = 0 & \text{en } \Omega, \\ g(t) = 0 & \text{en } \partial\Omega. \end{cases} \quad (40)$$

Por otro lado, las condiciones de *Neumann* se dan al evaluar la función en el dominio y las derivadas sobre la frontera del mismo, como se indica en la ecuación 41

$$\begin{cases} \mathcal{F}\left(\{t_k\}, u, \frac{du}{dt}, \frac{d^2u}{dt^2}, \dots, \frac{d^nu}{dt^n}, \Theta\right) = 0 & \text{en } \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial t_k} = 0 & \text{en } \partial\Omega. \end{cases} \quad (41)$$

Dado que en este trabajo se abordarán las ecuaciones cosmológicas contenidas en los primeros 4 capítulos, es suficiente definir dos parametrizaciones del tipo  $\Psi$ : las correspondientes a los problemas de valor inicial de *Dirichlet* y los problemas de *Neumann*.

En el caso que tomamos una ecuación diferencial de primer orden, el problema de valor inicial se transforma en las ecuaciones 42:

$$\begin{cases} \mathcal{F}\left(t, u, \frac{du}{dt}, \Theta\right) = 0, \\ u(t_0) = u_0. \end{cases} \quad (42)$$

Para este caso, la forma de construir  $\Psi$  es la misma que la propuesta por [31]. La condición inicial independiente de los parámetros de la red es la constante  $\phi(t) = u_0$ , y la parte que rige el comportamiento global de la solución, pero que no contribuye a las condiciones de frontera es  $\psi = (1 - e^{-(t-t_0)})ANN(t, \theta)$ . Entonces la parametrización de la red para el problema de valor inicial está dado por la ecuación 43

$$\Psi(t, \theta) = u_0 + \left(1 - e^{-(t-t_0)}\right) ANN(t, \theta). \quad (43)$$

Nótese que es posible elegir distintas parametrizaciones  $\psi$  que cumplan con  $\Psi(t_0, \theta) = u_0$ , pero esta elección cumple dos propiedades interesantes, que debido a la velocidad de convergencia de la exponencial son difícilmente iguales:

$$\begin{cases} \text{cuando } t \rightarrow \infty, \psi \rightarrow ANN \\ \text{cuando } t \rightarrow t_0, \Psi \rightarrow u_0 \text{ exponencialmente.} \end{cases} \quad (44)$$

Por otro lado, las condiciones de Neumann para una ecuación diferencial de segundo orden están dadas por 45

$$\begin{cases} \mathcal{F}\left(t, u, \frac{du}{dt}, \frac{d^2u}{dt^2}, \Theta\right) = 0, \\ u(t_0) = u_0, \\ \frac{du}{dt}|_{t_0} = v_0. \end{cases} \quad (45)$$

Para este caso, la parametrización es derivada de la 43, pues así se heredan las propiedades antes mencionadas. Para el caso de un problema de Neumann la parametrización está definida por la ecuación 46.

$$\Psi(t, \theta) = u_0 + (t - t_0)v_0 + \left(1 - e^{-(t-t_0)}\right)^2 ANN(t, \theta). \quad (46)$$

### 3.8. Datos observacionales

En el aprendizaje supervisado, los datos utilizados para el entrenamiento de los modelos a menudo provienen de observaciones, lo que puede implicar la presencia de incertidumbre, sesgos y ruido.

Datos de baja calidad pueden inducir sesgos en el modelo o llevar a que aprenda patrones irrelevantes, afectando su capacidad para generalizar y hacer predicciones precisas sobre nuevos datos. Un ejemplo común de este problema es el sobreajuste.

El sobre ajuste es posiblemente el principal problema cuando se está entrenando una red neuronal [41] [37], se trata del caso cuando el modelo se ha adaptado demasiado a los datos de entrenamiento, al punto de que es incapaz de generalizar lo aprendido haciendo predicciones sobre elementos fuera del conjunto de entrenamiento.

Las PINN son un tipo de redes neuronales que es menos sensible a los sesgos o ruido de los datos observacionales, pues cuenta con una componente muy importante: una directriz matemática. Esta directriz permite guiar el comportamiento global del modelo en algunos puntos clave o incluso el comportamiento global, pero velando por hacer una descripción de los datos lo más acertada posible.

Incluir datos observacionales al entrenamiento de las PINN se consigue a través del método de entrenamiento descrito en la sección 3.6. En el caso de una red neuronal totalmente conectada el entrenamiento se rige por la optimización de la función de costo y una PINN, por la de la función 36. Al considerar la contribución de los datos observacionales a través de la métrica  $\mathcal{L}_{data}$  (puede ser el error  $MSE$  u algún otro), esta se puede incluir dentro de la función de costo total 36, como se indica en la ecuación 47.

$$\mathcal{L} = \alpha_1 \mathcal{L}_{data} + \alpha_2 \mathcal{L}_{\mathcal{F}} + \alpha_3 \mathcal{L}_{u_0} + \alpha_4 \mathcal{L}_{\partial\Omega}. \quad (47)$$

Los coeficientes  $\alpha$  sirven para modular la influencia de cada componente y su impacto ulterior sobre el modelo resultante, entre menor sea su valor, menor será la influencia de esa contribución sobre el comportamiento final de la red. Generalmente el rango de  $\alpha$  está dado entre 0 y 1, donde 0 representa la nula contribución sobre el modelo final. El valor de cada uno dependerá, por ejemplo de qué se espera tomar más en cuenta en el modelo final: si se tienen datos muy ruidosos, posiblemente se quiera que  $\alpha_1 \ll \alpha_2$ .

### 3.9. Integrales

El enfoque numérico es esencial cuando se trata de integrales sin solución analítica. En esta sección se demostrará cómo las PINN ofrecen una alternativa poderosa para resolver integrales, mostrando su aplicabilidad más allá de las ecuaciones diferenciales.

El Teorema Fundamental del Cálculo establece una relación entre la derivada y la integral de una función bajo ciertas condiciones. Formalmente, si  $h : [a, b] \rightarrow R$  es una función continua, entonces la función  $u$  definida como:

$$u(t) = \int_{t_0}^t h(t', \Theta) dt' + u_0, \quad (48)$$

es continua en el intervalo  $[a, b]$  y diferenciable en el intervalo abierto  $(a, b)$ , y además cumple que:

$$\frac{du}{dt} = h(t, \Theta). \quad (49)$$

Por lo que una integral se puede llevar al problema de valor inicial 50, siempre y cuando  $h$  cumpla las condiciones del Teorema fundamental

$$\begin{cases} \mathcal{F}(t, u, \frac{du}{dt}, \Theta) = \frac{du}{dt} - h(t, \Theta) = 0, \\ u(t_0) = u_0. \end{cases} \quad (50)$$

Y se tiene entonces un problema de valor inicial que puede ser resuelto con cualquiera de los enfoques descritos a profundidad en las secciones anteriores.

### 3.10. Sistemas de ecuaciones diferenciales

Es muy común que el fenómeno que se desea modelar no esté determinado por una sola ecuación diferencial, si no que sea menester resolver todo un sistema de ecuaciones diferenciales. En general, un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, con  $t \in R$  y una función vectorial  $\vec{u} : R \rightarrow R^m$  es de la forma 51,

$$\vec{\mathcal{F}}\left(t, \vec{u}, \frac{d\vec{u}}{dt}, \frac{d^2\vec{u}}{dt^2}, \dots, \frac{d^n\vec{u}}{dt^n}, \Theta\right) = \vec{0}, \quad (51)$$

donde  $\vec{\mathcal{F}}$  es una función vectorial cuyas funciones componentes son de la forma 30, el caso para una sola ecuación diferencial ordinaria. El sistema 51 puede expresarse en forma matricial, como se observa en 52

$$\begin{pmatrix} \mathcal{F}_1(t, \vec{u}, \frac{d\vec{u}}{dt}, \frac{d^2\vec{u}}{dt^2}, \dots, \frac{d^n\vec{u}}{dt^n}, \Theta) \\ \mathcal{F}_2(t, \vec{u}, \frac{d\vec{u}}{dt}, \frac{d^2\vec{u}}{dt^2}, \dots, \frac{d^n\vec{u}}{dt^n}, \Theta) \\ \vdots \\ \mathcal{F}_m(t, \vec{u}, \frac{d\vec{u}}{dt}, \frac{d^2\vec{u}}{dt^2}, \dots, \frac{d^n\vec{u}}{dt^n}, \Theta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (52)$$

Con lo descrito hasta ahora, se podría resolver el sistema 52 asignando una red neuronal individual a cada una de las componentes de  $\vec{u}$  para luego integrar todas en la expresión del sistema. Sin embargo, como todo el sistema está parametrizado por una variable:  $t$ , se puede pedir directamente a una red neuronal que emule el comportamiento de la función vectorial solución  $ANN \sim \vec{u}$

$$ANN : t \in R \rightarrow R^m.$$

Lo anterior es simplemente una generalización del caso de una ecuación individual. Así que, la función de costo  $\mathcal{L}_{\vec{\mathcal{F}}}$  para el entrenamiento de la red estaría determinada por las contribuciones de cada una de las ecuaciones diferenciales que conforman el sistema, aplicadas a las componentes de  $ANN(t)$ , como indica la ecuación 53

$$\mathcal{L}_{\vec{\mathcal{F}}} = \sum_k^m \mathcal{L}_k = \sum_k^m \mathcal{F}_k \left( t, ANN, \frac{dANN}{dt}, \frac{d^2ANN}{dt^2}, \dots, \frac{d^nANN}{dt^n}, \Theta \right)^2. \quad (53)$$

El sistema de ecuaciones también puede tener un conjunto de restricciones iniciales o de frontera como las que ya se han comentado aquí. Igual que con las ecuaciones individuales, en este trabajo sólo se consideraran las condiciones de Dirichlet o Neumann. Los métodos para hacer a la red cumplir las mencionadas condiciones son los mismos que para el caso individual, incluir la restricción en la función de costo (sección 3.6) o hacer una parametrización de la red neuronal que fuerce a cumplir las restricciones (sección 3.7).

En primer lugar, la generalización de ambos enfoques se hará para cuando se tiene un problema de valor inicial con condiciones de Dirichlet, esto es, una serie de valores dados cuando  $\vec{u}(t_0)$  como en la ecuación 54

$$\vec{u}(t_0) = \vec{u}_0 = \begin{pmatrix} u_{1,0} \\ u_{2,0} \\ \vdots \\ u_{m,0} \end{pmatrix}. \quad (54)$$

Aquí el término  $\mathcal{L}_{u_0}$  se define como la suma de las contribuciones de cada una de las restricciones por componente de  $u(t_0)$ , como se muestra en 55

$$\mathcal{L}_{u_0} = \sum_k^m (ANN(t_0)_k - u_{k,0})^2, \quad (55)$$

donde el subíndice  $k$  representa la  $k$ -ésima componente del vector. Y la función de costo total puede ser completada según las condiciones adicionales del problema, como en la ecuación 36 o en 47, si se van a añadir datos observacionales.

En el otro enfoque, se debe realizar una parametrización de la red neuronal, tal que cumpla las condiciones iniciales. De forma natural se puede hacer la generalización de la parametrización 43 a su forma vectorial, dada por la ecuación 56

$$\vec{\Psi}(t, \theta) = \underbrace{\vec{u}_0}_{\in R^m} + \underbrace{\left(1 - e^{-(t-t_0)}\right)}_{\in R} \underbrace{ANN(t, \theta)}_{\in R^m}. \quad (56)$$

La parametrización 56 además de cumplir con las condiciones iniciales también tiene como componentes las parametrizaciones de cada solución original, de la forma 43, por lo que hereda las propiedades mencionadas en 44

$$\vec{u}(t_0) = \begin{pmatrix} u_{1,0} \\ u_{2,0} \\ \vdots \\ u_{m,0} \end{pmatrix}, \quad \frac{d\vec{u}}{dt} \Big|_{t_0} = \vec{v}_0 = \begin{pmatrix} v_{1,0} \\ v_{2,0} \\ \vdots \\ v_{m,0} \end{pmatrix}. \quad (57)$$

Por otro lado, los métodos para abordar las condiciones de Neuman (ecuación 57) se generalizan de manera similar a la mencionada para las condiciones de Dirichlet

$$\mathcal{L}_{u_0} = \sum_k^m \left[ (ANN(t_0)_k - u_{k,0})^2 + \left( \frac{dANN}{dt}(t_0)_k - v_{k,0} \right)^2 \right], \quad (58)$$

y su respectiva parametrización está definida por la generalización de 46, definida en la ecuación 59

$$\vec{\Psi}(t, \theta) = \vec{u}_0 + (t - t_0)\vec{v}_0 + \left(1 - e^{-(t-t_0)}\right)^2 ANN(t, \theta). \quad (59)$$

Así, se ha establecido la metodología para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales utilizando PINN, con condiciones de frontera de Dirichlet o de Neumann.

### 3.11. Sistemas de ED Parciales

Una ecuación diferencial parcial es una ecuación que depende de múltiples variables independientes y las derivadas respecto a dichas variables. La forma más general de una EDP, dada una función escalar  $u : R^n \rightarrow R$ , con variables  $t_1, t_2, \dots, t_n \in R$  está dada por la ecuación 60

$$\mathcal{F}(t_1, \dots, t_n; u, \frac{\partial u}{\partial t_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial t_n}; \frac{\partial^2 u}{\partial t_1 \partial t_1}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial t_1 \partial t_n}; \dots) = 0. \quad (60)$$

Al igual que para el caso de las ecuaciones ordinarias, una ecuación diferencial parcial debe contar con algunas condiciones para ser determinada en su totalidad. Esto incluye algunas soluciones particulares respecto a alguna de las variables o condiciones iniciales similares a las de 34 o de entorno como las definidas en 35. Dicho eso, la manera de resolver una ecuación diferencial parcial es exactamente la misma que cuando se aborda una ecuación diferencial ordinaria, pero en este caso tomando las derivadas parciales en vez de las totales.

### 3.12. PINN dependiente de las condiciones iniciales o parámetros libres

Dado que un sistema de ecuaciones depende de las condiciones iniciales y de entorno para quedar completamente determinado, cuando se resuelve un sistema de forma numérica, estas deben ser establecidas desde el inicio. Por lo tanto, para distintas combinaciones de condiciones iniciales y de frontera, es necesario implementar el código numérico por completo. Esto puede resultar computacionalmente muy costoso entre más predicciones se requieran.

Por otro lado, en los fenómenos físicos suele haber parámetros libres, representados aquí por el conjunto  $\Theta$ , y cuyo valor determina los modelos que se obtendrán, ya sea al resolver sistemas de ecuaciones o al ser inferidos a partir de observaciones.

Una de las enormes ventajas que tiene el abordar las soluciones a ecuaciones diferenciales desde las redes neuronales es que, se puede crear una arquitectura de red y un entrenamiento tal que tanto las condiciones iniciales como los parámetros libres puedan formar parte de las variables de la red, y por ende, ser evaluadas en cualesquiera combinaciones de estos (Figura 2).

Para mostrar cómo se implementa esto dentro de todo lo que se ha descrito hasta ahora, se considerará el caso donde se tiene un sistema de ecuaciones, que deben cumplir condiciones de frontera de Dirichlet o de Neumann. Se asume también que el sistema tiene un conjunto de parámetros libres asociados  $\Theta$ .

Lo primero es entender que en el caso cuando se tiene un sistema de ecuaciones diferenciales de la forma 51

$$\vec{\mathcal{F}}\left(t, \vec{u}, \frac{d\vec{u}}{dt}, \frac{d^2\vec{u}}{dt^2}, \dots, \frac{d^n\vec{u}}{dt^n}, \Theta\right) = \vec{0}, \quad (61)$$

$\vec{u}$  depende de la variable independiente  $t$ , por lo que, si  $ANN \sim u$ , entonces  $ANN \equiv ANN(t)$ . Es de notar que desde el inicio del capítulo se estableció que  $\vec{\mathcal{F}}$  depende de los parámetros  $\Theta$ , y estos entran en la ecuación de costo 53, pero estos son parámetros libres, por lo que determinan diferentes sistemas de ecuaciones para diferentes combinaciones de valores.

Es posible incluir la dependencia de  $\Theta$  en la PINN, convirtiendo los parámetros libres en variables independientes, esto es:

$$ANN(t) \longrightarrow ANN(t, \Theta). \quad (62)$$

En el contexto del modelo,  $\theta$  representa los parámetros de la red neuronal, tales como los pesos y sesgos, que se ajustan durante el proceso de entrenamiento para minimizar la función de costo. Por otro lado,  $\Theta$  originalmente representaba los parámetros libres del fenómeno descrito por la función  $\mathcal{F}$ . Sin embargo, en este enfoque,  $\Theta$  ahora se incluye como un conjunto de variables adicionales en el modelo, permitiendo que la red neuronal no solo aprenda a emular la relación funcional entre los datos, sino también a considerar las variaciones en estos parámetros  $\Theta$ .

Es importante destacar que, aunque ambos conjuntos de variables son parte del modelo,  $\theta$  y  $\Theta$  permanecen independientes entre sí. Por lo tanto,  $\Theta$  no influye directamente en los parámetros de la red, sino que actúa como un conjunto de entradas o condiciones que afectan la salida del modelo, sin alterar los pesos y sesgos internos de la red.

Es decir, que al incluir distintas combinaciones de estos parámetros durante el entrenamiento, el modelo final podrá ser evaluado en esas combinaciones también. Es notar que al agregar más variables, las derivadas ordinarias deben ser ahora consideradas derivadas parciales, por lo que la ecuación 61 debe derivar en la función de costo 63

$$\mathcal{L}_{\vec{\mathcal{F}}} = \sum_k^m \mathcal{L}_k = \sum_k^m \mathcal{F}_k \left( t, ANN, \frac{\partial ANN}{\partial t}, \frac{\partial^2 ANN}{\partial t^2}, \dots, \frac{\partial^n ANN}{\partial t^n}, \Theta \right)^2. \quad (63)$$

Como síntesis de lo anterior, se puede decir que incluyendo a los parámetros libres como variables de la red, se puede entrenar un modelo que pueda ser evaluado para distintas combinaciones de ellos sin necesidad de resolver el sistema de ecuaciones diferenciales nuevamente, que sería lo necesario en un método numérico tradicional.

Las condiciones iniciales y de frontera abordadas en este trabajo (Dirichlet y Neumann) pueden ser también integradas como variables del modelo provisto por la red neuronal (ver Figura 2). Dado que hay dos enfoques para cumplir las condiciones iniciales, ambos permiten ver a las condiciones iniciales como variables del modelo. En este trabajo sólo se considerará el método de parametrización.

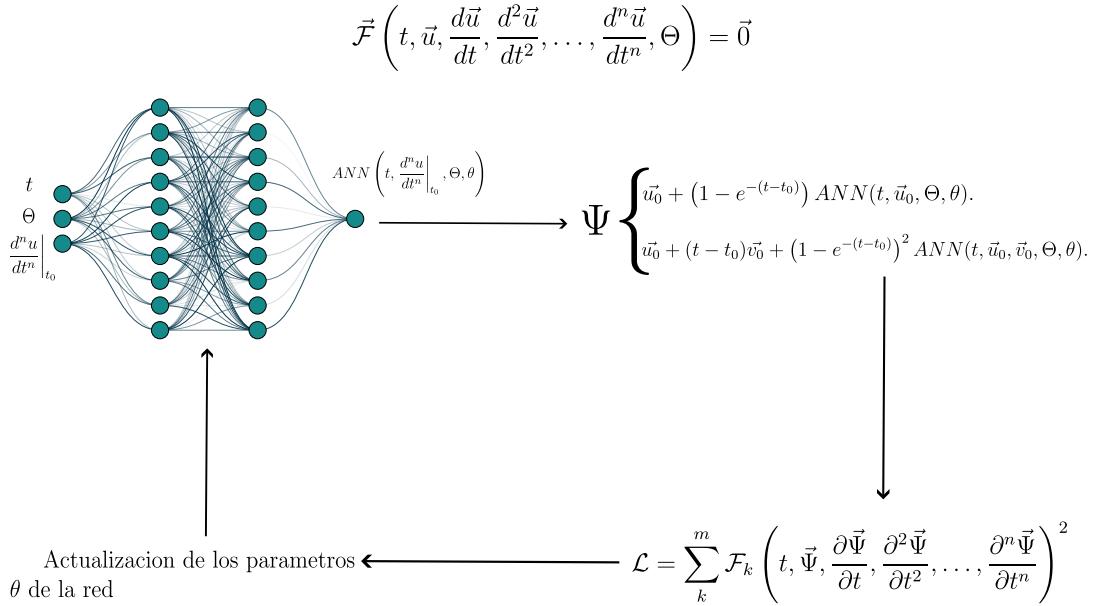


Figura 2: Parametrización de la red para la solución de un sistema de ecuaciones diferenciales con condiciones iniciales y parámetros libres como variables del modelo. El proceso es el mismo que el descrito en la Figura 1, y aquí se muestran las dos posibles parametrizaciones para resolver un problema de valor inicial o uno de Neumann, según sea el caso.

La idea tras las condiciones iniciales variables es, en esencia, la misma tras los parámetros libres variables explicados arriba. Estas pasan de ser valores constantes, a variables independientes definidas sobre un rango, que serán evaluadas en la ecuación diferencial. De nuevo, partiendo desde un sistema de ecuaciones diferenciales definido como el sistema 61, y asumiendo que se trata de un problema de valor inicial de Dirichlet, pues el de Neumann es completamente análogo, se incluirán las condiciones iniciales como variables de la red neuronal

$$ANN(t) \longrightarrow ANN(t, \vec{u}_0, \Theta), \quad (64)$$

donde la ecuación 64 representa que también ya se ha asumido que existen parámetros libres asociados al problema, y que serán incluidos como variables. Luego, con el fin de cumplir las condiciones iniciales del problema se tomará la parametrización 56, con las nuevas variables añadidas a la red neuronal.

$$\vec{\Psi}(t, \vec{u}_0, \Theta, \theta) = \vec{u}_0 + \left(1 - e^{-(t-t_0)}\right) ANN(t, \vec{u}_0, \Theta, \theta). \quad (65)$$

Luego, será la parametrización 65 la que entrará a la función de costo para proveer de las soluciones del sistema, por lo que la función de costo estará definida por 66

$$\mathcal{L} = \sum_k^m \mathcal{F}_k \left( t, \vec{\Psi}(t, \vec{u}_0, \Theta, \theta), \frac{\partial \vec{\Psi}(t, \vec{u}_0, \Theta, \theta)}{\partial t}, \frac{\partial^2 \vec{\Psi}(t, \vec{u}_0, \Theta, \theta)}{\partial t^2}, \dots, \frac{\partial^n \vec{\Psi}(t, \vec{u}_0, \Theta, \theta)}{\partial t^n} \right)^2, \quad (66)$$

Donde nuevamente el subíndice  $k$  representa la  $k$ -ésima ecuación diferencial del sistema.

## 4. Resultados

### 4.1. Ecuación diferencial con un parámetro libre: reparametrización vs función de costo

Para comenzar a describir el background de ecuaciones diferenciales cosmológicas, se tomará el caso cuando el universo está descrito a redshift cercanos, por lo que la contribución de la radiación puede ser despreciada y las componentes que determinan el comportamiento y evolución del cosmos son  $\rho_m(z)$  y  $\rho_\Lambda(z)$ .

La evolución de este escenario estará determinada entonces por el problema de valor inicial dado en la ecuación 67

$$\begin{cases} \mathcal{F}(z, u, \frac{du}{dz}) = \frac{du}{dz} - \frac{3u}{1+z} = 0, \\ u(z_0 = 0) = \Omega_{m,0}. \end{cases} \quad (67)$$

En este caso, como se trata de un problema de valor inicial, se creará un modelo de PINN,  $ANN(z, \Omega_{m,0})$ , capaz de ser evaluado tanto en  $z$  como en  $\Omega_{m,0}$ . Es posible utilizar tanto el enfoque de las condiciones iniciales como el de la reparametrización del modelo  $ANN$ . Aquí se utilizarán ambos métodos para mostrar que son efectivos y para comparar el desempeño de cada uno frente al otro.

En primer lugar, para incluir la condición inicial variable dentro de la función de costo, se considera la contribución de la ecuación diferencial  $\mathcal{F}$ , definida al sustituir la red neuronal en la ecuación 67, lo que deriva en la ecuación 68

$$\mathcal{L}_{\mathcal{F}} = \left( \frac{\partial ANN(z, \Omega_{m,0})}{\partial z} - \frac{3ANN(z, \Omega_{m,0})}{1+z} \right)^2. \quad (68)$$

Ahora, para incluir las condiciones iniciales dentro de la función de costo, como se describió en la sección 3.6, se considera la contribución de la condición inicial, sustituyendo la salida de la red neuronal en la ecuación 34. Por lo tanto, la contribución de las condiciones iniciales en la función de costo está dada por la ecuación 69

$$\mathcal{L}_{\Omega_{m,0}} = (ANN(0, \Omega_{m,0}) - \Omega_{m,0})^2. \quad (69)$$

En la práctica, se utiliza un conjunto de entrenamiento que contiene  $n$  diferentes elementos  $x = [z, \Omega_{m,0}]$ , con diversas combinaciones de valores dentro de un rango determinado. Así, el costo total para el entrenamiento de la PINN está definido por la ecuación 70.

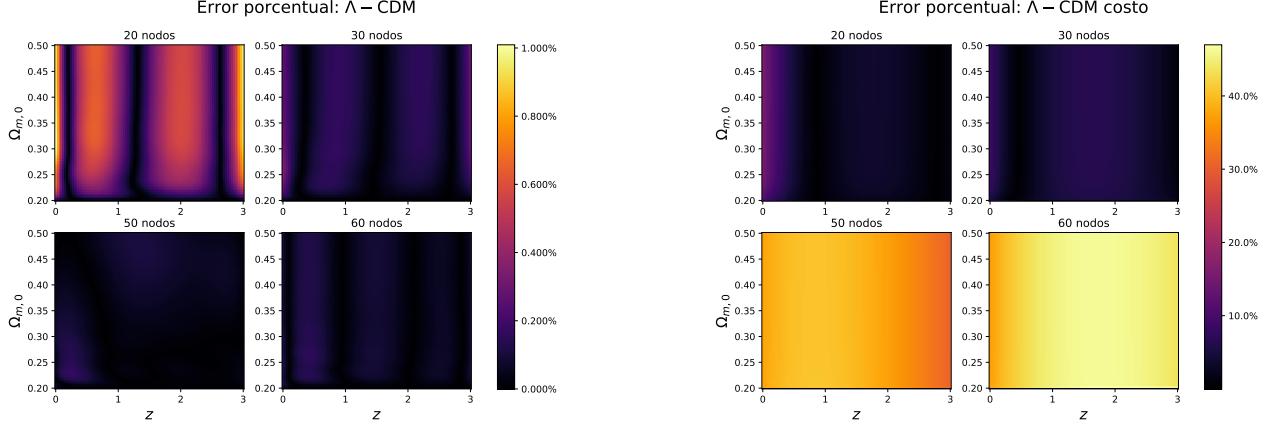
$$\mathcal{L} = \frac{1}{n} \sum_x (\mathcal{L}_{\mathcal{F}} + \mathcal{L}_{\Omega_{m,0}}). \quad (70)$$

Por otro lado, para el método de reparametrización, es necesario redefinir la red neuronal utilizando la ecuación 43, lo que resulta en la expresión 71.

$$\Psi(z, \Omega_{m,0}) = \Omega_{m,0} + \left( 1 - e^{-(z-z_0)} \right) ANN(z, \Omega_{m,0}), \quad z_0 = 0. \quad (71)$$

Como ya se detalló en secciones anteriores, la ecuación 71 será evaluada en la función de costo 56. En este caso, como sólo se cuenta con una única ecuación diferencial,  $k = 1$ . Igual que con la ecuación 70, se deben considerar todos los  $n$  elementos  $x$  que forman parte del conjunto de entrenamiento.

Para comparar ambos enfoques, se utilizó el mismo dataset de entrenamiento con rangos  $z \in [0,0, 3,0]$  y  $\Omega_{m,0} \in [0,2, 0,5]$ . Estos valores se eligieron por ser válidos para despreciar la radiación y



(a) Mapas del error porcentual por cada modelo, bajo el enfoque de parametrización de la PINN. Cada una con dos capas ocultas, pero diferente número de nodos por capa. Cada punto del mapa representa la diferencia porcentual entre la parametrización de la PINN y la solución real evaluadas en una combinación del corrimiento al rojo  $z$  y la condición inicial  $\Omega_{m,0}$ .

(b) Mapas del error porcentual por cada modelo, bajo el enfoque de imposición. Cada una con dos capas ocultas, pero diferente número de nodos por capa. Cada punto del mapa representa la diferencia porcentual entre la PINN y la solución real evaluadas en una combinación del corrimiento al rojo  $z$  y la condición inicial  $\Omega_{m,0}$ .

Figura 3: Comparación de mapas de error porcentual bajo dos enfoques diferentes: (a) parametrización de la PINN y (b) imposición directa.

abarcar  $\Omega_{m,0}$  actual. El conjunto de entrenamiento  $x$  incluyó 4000 elementos generados uniformemente dentro de estos rangos, con permutaciones aleatorias para evitar el aprendizaje secuencial.

El **loop de aprendizaje** utilizó el optimizador **Adam** con tasa de aprendizaje variable controlada manualmente:  $lr = 10^{-2}, 10^{-3}, 5 \times 10^{-4}$  durante  $10^4, 4 \times 10^4$  y  $3 \times 10^4$  épocas, respectivamente. Esta elección buscó equilibrar rapidez y estabilidad, comenzando con  $lr$  alto para convergencia rápida, y reduciéndolo después para ajustes finos.

Se entrenaron arquitecturas con dos capas ocultas y nodos variables: 20, 30, 50 y 60. Esto garantizó aproximaciones efectivas con costos computacionales moderados, según el teorema de aproximación universal. Se evaluaron ambos enfoques, parametrización y función de costo, comparando el error porcentual entre la PINN y la solución analítica en una malla de prueba.<sup>2</sup>

Los resultados (Figuras 3b y 3a) mostraron que la parametrización fue superior, alcanzando errores del 1% al 0,2% según el número de nodos. En contraste, la función de costo sólo logró convergencia con arquitecturas de 20 y 30 nodos, fallando con 50 y 60. Este enfoque requiere  $\sim 10^2$  veces más datos para converger eficientemente.

Se concluye que arquitecturas con más nodos mejoran la parametrización, aunque con mayor costo computacional. La función de costo es útil con grandes volúmenes de datos o cuando no es posible parametrizar, como al incluir datos observacionales sin condiciones iniciales.

## 4.2. Conclusiones

En este trabajo se presentó un análisis comparativo entre el método de parametrización directa y el enfoque basado en la definición de una función de costo  $\mathcal{L}_F$ , aplicado en el contexto de redes neuronales físicamente informadas (PINN). Esto permitió explorar las capacidades y limitaciones de ambos métodos al abordar problemas definidos por relaciones implícitas, como aquellas derivadas de ecuaciones diferenciales.

El método basado en la parametrización de la red neuronal demostró ser un enfoque poderoso debido a su capacidad para incorporar directamente restricciones iniciales y de frontera en el entrenamiento de la red neuronal. Este método permite emular soluciones que respetan las leyes fundamentales de los fenómenos modelados, incluso en sistemas con condiciones límite complejas. Al no depender de

<sup>2</sup>El código utilizado está disponible en [https://github.com/JuanDDiosRojas/Thesis\\_Master.git](https://github.com/JuanDDiosRojas/Thesis_Master.git).

datos observacionales etiquetados, este enfoque se enmarca dentro del aprendizaje no supervisado, eliminando los sesgos inherentes a los datos y garantizando soluciones libres de ruido observacional.

Por otro lado, el método de incluir las condiciones iniciales o de frontera, muestra simplicidad y efectividad en problemas menos complejos. Aunque su implementación es más sencilla, este método puede resultar insuficiente cuando se requiere una representación precisa de las relaciones implícitas que gobiernan el sistema.

Desde un punto de vista computacional, el método de  $\mathcal{L}_F$  implica un mayor esfuerzo debido a la necesidad de evaluar constantemente la expresión matemática subyacente y sus gradientes durante el proceso de entrenamiento. Sin embargo, este costo adicional se ve compensado por la mayor precisión y generalización obtenidas en las soluciones. Mientras que el método de imposición permite incluir una contribución de datos observacionales en el entrenamiento.

En conclusión, el enfoque basado en  $\mathcal{L}_F$  se presenta como una herramienta robusta y flexible para resolver problemas de interés en física y cosmología, especialmente cuando se requiere emular relaciones matemáticas complejas sin depender de datos observacionales. Este método establece un marco sólido para el desarrollo de aplicaciones más avanzadas de PINN, con un amplio potencial para explorar nuevos problemas y contextos. Asimismo, futuras investigaciones podrían enfocarse en combinar las ventajas de ambos métodos, integrando la simplicidad del método de parametrización directa con la robustez del enfoque de  $\mathcal{L}_F$  para abordar una gama más amplia de problemas. De esta manera, se abren nuevas posibilidades para el modelado y la simulación en áreas de alta relevancia científica.

## 5. Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo proporcionado por el proyecto UNAM-DGAPA-PAPIIT IA104221.

## Referencias

- [1] S. Apunevych et al. *WMAP2006: Cosmological Parameters and Large-scale Structure of the Universe*. 2008. arXiv: 0802.0599 [astro-ph].
- [2] U.M. Ascher, R.M.M. Mattheij y R.D. Russell. *Numerical Solution of Boundary Value Problems for Ordinary Differential Equations*. Classics in Applied Mathematics. Society for Industrial y Applied Mathematics (SIAM, 3600 Market Street, Floor 6, Philadelphia, PA 19104), 1994. ISBN: 9781611971231. URL: <https://books.google.com.mx/books?id=0Rv0rn04WgwC>.
- [3] Matthias Bartelmann. «Gravitational lensing». En: *Classical and Quantum Gravity* 27.23 (nov. de 2010), pág. 233001. ISSN: 1361-6382. DOI: 10.1088/0264-9381/27/23/233001. URL: <http://dx.doi.org/10.1088/0264-9381/27/23/233001>.
- [4] Vanessa Buhrmester, David Münch y Michael Arens. *Analysis of Explainers of Black Box Deep Neural Networks for Computer Vision: A Survey*. 2019. arXiv: 1911.12116 [cs.AI]. URL: <https://arxiv.org/abs/1911.12116>.
- [5] R. R. Caldwell. «An introduction to quintessence». En: *Brazilian Journal of Physics* 30.2 (2000), 215–229. ISSN: 0103-9733. DOI: 10.1590/S0103-97332000000200002. URL: <https://doi.org/10.1590/S0103-97332000000200002>.
- [6] R. R. Caldwell. «An introduction to quintessence.» En: *Brazilian Journal of Physics* 30.2 (jun. de 2000), págs. 215-229.
- [7] Jazhiel Chacón et al. «Analysis of dark matter halo structure formation in N-body simulations with machine learning». En: *Physical Review D* 107.12 (jun. de 2023). ISSN: 2470-0029. DOI: 10.1103/physrevd.107.123515. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.107.123515>.
- [8] Augusto T. Chantada et al. «Cosmology-informed neural networks to solve the background dynamics of the Universe». En: *Phys. Rev. D* 107 (6 2023), pág. 063523. DOI: 10.1103/PhysRevD.107.063523. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.107.063523>.
- [9] Chang Chen et al. *Learning the Evolution of the Universe in N-body Simulations*. 2020. arXiv: 2012.05472 [astro-ph.CO].

- [10] Michel Chevallier y David Polarski. «ACCELERATING UNIVERSES WITH SCALING DARK MATTER». En: *International Journal of Modern Physics D* 10.02 (abr. de 2001), 213–223. ISSN: 1793-6594. DOI: 10.1142/S0218271801000822. URL: <http://dx.doi.org/10.1142/S0218271801000822>.
- [11] Edmund J. Copeland, Andrew R. Liddle y David Wands. «Exponential potentials and cosmological scaling solutions». En: *Physical Review D* 57.8 (abr. de 1998), 4686–4690. ISSN: 1089-4918. DOI: 10.1103/physrevd.57.4686. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.57.4686>.
- [12] Juan de Dios Rojas Olvera, Isidro Gómez-Vargas y Jose Alberto Vázquez. «Observational Cosmology with Artificial Neural Networks». En: *Universe* 8.2 (2022). ISSN: 2218-1997. DOI: 10.3390/universe8020120. URL: <https://www.mdpi.com/2218-1997/8/2/120>.
- [13] A. Einstein. «Die Grundlage der allgemeinen Relativitätstheorie». En: *Annalen der Physik* 354.7 (1916), págs. 769-822. DOI: <https://doi.org/10.1002/andp.19163540702>. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/andp.19163540702>. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19163540702>.
- [14] Chunling Fan et al. «Bayesian Neural Networks and Its Application». En: *2008 Fourth International Conference on Natural Computation*. Vol. 3. 2008, págs. 446-450. DOI: 10.1109/ICNC.2008.624.
- [15] Sarvesh Gharat y Yogesh Dandawate. «Galaxy classification: a deep learning approach for classifying Sloan Digital Sky Survey images». En: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 511.4 (feb. de 2022), págs. 5120-5124. ISSN: 0035-8711. DOI: 10.1093/mnras/stac457. eprint: <https://academic.oup.com/mnras/article-pdf/511/4/5120/42688228/stac457.pdf>. URL: <https://doi.org/10.1093/mnras/stac457>.
- [16] Edwin Hubble. «A Relation between Distance and Radial Velocity among Extra-Galactic Nebulae». En: *Proceedings of the National Academy of Science* 15.3 (mar. de 1929), págs. 168-173. DOI: 10.1073/pnas.15.3.168.
- [17] Carmen Jimenez-Mesa et al. «A non-parametric statistical inference framework for Deep Learning in current neuroimaging». En: *Information Fusion* 91 (2023), págs. 598-611. ISSN: 1566-2535. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.inffus.2022.11.007>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1566253522002172>.
- [18] Laurent Valentin Jospin et al. «Hands-On Bayesian Neural Networks—A Tutorial for Deep Learning Users». En: *IEEE Computational Intelligence Magazine* 17.2 (2022), págs. 29-48. DOI: 10.1109/MCI.2022.3155327.
- [19] Zihan Kang et al. «Periodic Variable Star Classification with Deep Learning: Handling Data Imbalance in an Ensemble Augmentation Way». En: *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 135.1051 (2023), pág. 094501. DOI: 10.1088/1538-3873/acf15e. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/1538-3873/acf15e>.
- [20] Jens Kujat, Robert J. Scherrer y A. A. Sen. «Phantom dark energy models with negative kinetic term». En: *Phys. Rev. D* 74 (8 2006), pág. 083501. DOI: 10.1103/PhysRevD.74.083501. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.74.083501>.
- [21] I.E. Lagaris, A. Likas y D.I. Fotiadis. «Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations». En: *IEEE Transactions on Neural Networks* 9.5 (1998), págs. 987-1000. DOI: 10.1109/72.712178.
- [22] Ofer Lahav y Andrew R Liddle. *The Cosmological Parameters* (2019). 2019. arXiv: 1912.03687 [astro-ph.CO].
- [23] Xiaolei Li et al. «Revisiting Metastable Dark Energy and Tensions in the Estimation of Cosmological Parameters». En: *The Astrophysical Journal* 887.2 (dic. de 2019), pág. 153. ISSN: 1538-4357. DOI: 10.3847/1538-4357/ab535d. URL: <http://dx.doi.org/10.3847/1538-4357/ab535d>.
- [24] Andrew Liddle. *An introduction to modern cosmology*. John Wiley y Sons, 2015.
- [25] Eric V. Linder. «Exploring the Expansion History of the Universe». En: *Phys. Rev. Lett.* 90 (9 2003), pág. 091301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.091301. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.091301>.

- [26] Eric V. Linder. «The dynamics of quintessence, the quintessence of dynamics». En: *General Relativity and Gravitation* 40.2–3 (dic. de 2007), 329–356. ISSN: 1572-9532. DOI: 10.1007/s10714-007-0550-z. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s10714-007-0550-z>.
- [27] Dao-Jun Liu et al. «Revisiting the parametrization of equation of state of dark energy via SNIa data». En: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 388.1 (jul. de 2008), págs. 275-281. ISSN: 0035-8711. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2008.13380.x. eprint: <https://academic.oup.com/mnras/article-pdf/388/1/275/18721496/mnras0388-0275.pdf>. URL: <https://doi.org/10.1111/j.1365-2966.2008.13380.x>.
- [28] Yulong Lu y Jianfeng Lu. «A Universal Approximation Theorem of Deep Neural Networks for Expressing Probability Distributions». En: *Advances in Neural Information Processing Systems*. Ed. por H. Larochelle et al. Vol. 33. Curran Associates, Inc., 2020, págs. 3094-3105. URL: [https://proceedings.neurips.cc/paper\\_files/paper/2020/file/2000f6325dfc4fc3201fc45ed01c7a5d-Paper.pdf](https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2020/file/2000f6325dfc4fc3201fc45ed01c7a5d-Paper.pdf).
- [29] Michaël Malquarti y Andrew R. Liddle. «Initial conditions for quintessence after inflation». En: *Physical Review D* 66.2 (jul. de 2002). ISSN: 1089-4918. DOI: 10.1103/physrevd.66.023524. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.66.023524>.
- [30] John Martin y Hanspeter Schaub. «Physics-informed neural networks for gravity field modeling of the Earth and Moon». En: *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy* 134.2, 13 (abr. de 2022), pág. 13. DOI: 10.1007/s10569-022-10069-5.
- [31] Marios Mattheakis et al. «Hamiltonian neural networks for solving equations of motion». En: *Phys. Rev. E* 105 (6 2022), pág. 065305. DOI: 10.1103/PhysRevE.105.065305. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.105.065305>.
- [32] S P Moschou et al. «Physics-informed neural networks for modeling astrophysical shocks». En: *Machine Learning: Science and Technology* 4.3 (2023), pág. 035032. DOI: 10.1088/2632-2153/acf116. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/2632-2153/acf116>.
- [33] Michael Edward Peskin y Daniel V. Schroeder. *An Introduction to Quantum Field Theory*. Reading, USA: Addison-Wesley (1995) 842 p. Westview Press, 1995.
- [34] Planck Collaboration et al. «Planck 2015 results - XIII. Cosmological parameters». En: *AandA* 594 (2016), A13. DOI: 10.1051/0004-6361/201525830. URL: <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201525830>.
- [35] Maziar Raissi, Paris Perdikaris y George Em Karniadakis. *Physics Informed Deep Learning (Part I): Data-driven Solutions of Nonlinear Partial Differential Equations*. 2017. arXiv: 1711.10561 [cs.AI]. URL: <https://arxiv.org/abs/1711.10561>.
- [36] Adam G. Riess et al. «Observational Evidence from Supernovae for an Accelerating Universe and a Cosmological Constant». En: *The Astronomical Journal* 116.3 (1998), pág. 1009. DOI: 10.1086/300499. URL: <https://dx.doi.org/10.1086/300499>.
- [37] Shaeke Salman y Xiuwen Liu. *Overfitting Mechanism and Avoidance in Deep Neural Networks*. 2019. arXiv: 1901.06566 [cs.LG]. URL: <https://arxiv.org/abs/1901.06566>.
- [38] Monique Signore y Denis Puy. «Primordial nucleosynthesis». En: *New Astronomy Reviews* 43.2 (1999), págs. 185-200. ISSN: 1387-6473. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1387-6473\(99\)00011-1](https://doi.org/10.1016/S1387-6473(99)00011-1). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1387647399000111>.
- [39] D. N. Spergel et al. «First-Year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP)\* Observations: Determination of Cosmological Parameters». En: *The Astrophysical Journal Supplement Series* 148.1 (2003), pág. 175. DOI: 10.1086/377226. URL: <https://dx.doi.org/10.1086/377226>.
- [40] J. Alberto Vázquez et al. «Bayesian model selection on scalar  $\epsilon$ -field dark energy». En: *Phys. Rev. D* 103 (4 2021), pág. 043506. DOI: 10.1103/PhysRevD.103.043506. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.103.043506>.
- [41] Xue Ying. «An Overview of Overfitting and its Solutions». En: *Journal of Physics: Conference Series* 1168.2 (2019), pág. 022022. DOI: 10.1088/1742-6596/1168/2/022022. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/1168/2/022022>.

# Perspectiva microestructural y mecánica del sistema AlZnAg

S. Valdez Rodríguez

svaldez@icf.unam.mx

## Introducción

En los sistemas de aleación bajo condiciones de colada, la microestructura resultante de la solidificación está formada por policristales o granos, los cuales están compuestos de cristales primarios monofásicos, conocidos como celdas o dendritas, y para ciertas condiciones de composición química o térmica es posible encontrar estructuras polifásicas, mejor conocidas como eutécticos<sup>1</sup>.

La presencia y el crecimiento de cada microestructura está determinada por condiciones experimentales en estado estable o de equilibrio, tales como: gradiente de temperatura y velocidad de enfriamiento del baño líquido. Estos parámetros pueden ser monitoreados y controlados para predecir y propiciar la microestructura deseada, así como las fases secundarias, que se forman bajo condiciones cercanas al equilibrio.

## Microestructura dendrítica

El crecimiento dendrítico, es la microestructura de mayor frecuencia en aleaciones de aluminio<sup>2</sup>. La formación dendrítica y su crecimiento ramificado son de los procesos más importantes que ocurren durante la solidificación.

---

<sup>1</sup> Tang, J., Lambie, S., Meftahi, N. *et al.* Unique surface patterns emerging during solidification of liquid metal alloys. *Nat. Nanotechnol.* **16**, 431–439 (2021).

<sup>2</sup> Liu, H., Lu, S., Zhang, Y. *et al.* Migration of solidification grain boundaries and prediction. *Nat Commun* **13**, 5910 (2022).

Esta microestructura dendrítica, es un arreglo de ramas o brazos primarios, secundarios y terciarios con direcciones cristalográficas específicas en un acomodo de morfología equiaxial, columnar o ambas. Las regiones entre las ramas dendríticas o espacios interdendríticos, es posible hallar la presencia de fases secundarias o de compuestos intermetálicos o de ambos<sup>3</sup>.

La estructura dendrítica de morfología celular puede observarse en la figura 1, corresponde a un sistema de aleación binaria Al-Zn solidificada en condiciones de colada, fuera del equilibrio termodinámico. Es conocido que este tipo de morfología dendrítica, se encuentra relacionada con una variación del tipo :

$$\frac{G}{V} > \frac{\Delta T}{D}$$

Donde G es el gradiente de temperatura en el líquido (K/cm), V es la velocidad de avance de la interface (cm/s),  $\Delta T$  el rango de subenfriamiento de la aleación en equilibrio y D es el coeficiente de difusión de soluto en el líquido.

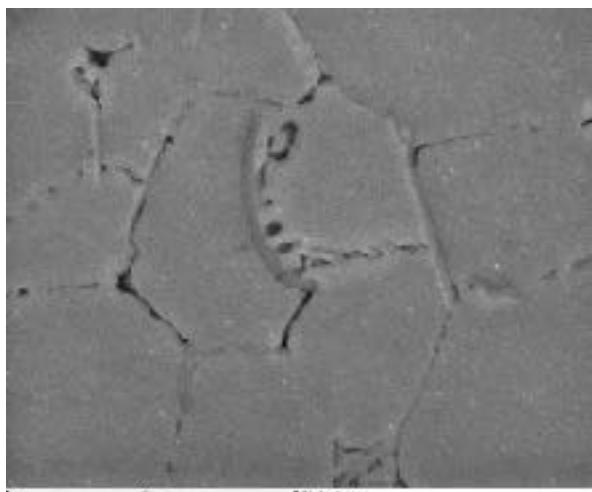


Figura 1. Microestructura de la aleación binaria solidificada en molde de arena,  $G/V$  es ligeramente más pequeña que la relación  $\Delta T/D$ , y considera condiciones microestructurales tales como la segregación de soluto o la estabilidad morfológica<sup>4</sup>.

<sup>3</sup> Suvorova, V., Volodko, S., Suvorov, D. et al. Enhanced microstructure and mechanical properties of ZrN-reinforced AlSi10Mg aluminum matrix composite. *Sci Rep* **14**, 10152 (2024).

<sup>4</sup> Ren, N., Li, J., Zhang, R. et al. Solute trapping and non-equilibrium microstructure during rapid solidification of additive manufacturing. *Nat Commun* **14**, 7990 (2023).

## Solidificación

El proceso de solidificación concluye cuando el líquido se transforma en sólido, la condición física que conlleva el evento es la disminución en la temperatura del líquido, a consecuencia de la extracción del calor latente.

Cuando el proceso de solidificación se lleva a cabo con un elevada velocidad de enfriamiento, la microestructura dendrítica resultante estará constituida por una composición química que sobrepase el límite de solubilidad del soluto, con ello es frecuente hallar un aumento en la dispersión de fases secundarias metaestables, a la vez un refinamiento en el tamaño de grano. Este procedimiento tiene lugar a través de técnicas de solidificación rápida, para estas técnicas se considera que el descenso de la temperatura permite llegar a velocidades de enfriamiento entre  $10^2$  K/s y  $10^7$  K/s. Las principales características en el proceso de solidificación rápida son las modificaciones en la extensión de la solubilidad en estado sólido, la disminución tanto en el tamaño de grano, en el espaciamiento eutéctico, como en los brazos dendríticos primarios y secundarios; así como la obtención de altas concentraciones de defectos de red, variaciones en el esquema de segregación de soluto, formación de fases metaestables, y la obtención de vidrios metálicos<sup>5</sup>.

## Aluminio y aleaciones

Las aleaciones base aluminio son consideradas en aplicaciones estructurales, aeronáutica-aeroespacial o en la industria automotriz, debido a su buena ductilidad, conformabilidad, baja densidad y resistencia a la corrosión; también se han utilizado para aplicaciones nucleares, debido a su resistencia a los daños por radiación, alta conductividad térmica y baja absorción de neutrones<sup>6</sup>. El aluminio posee una densidad de 2.7 g/cm<sup>3</sup> muy baja en comparación con la del acero de 7.85 g/cm<sup>3</sup>. Las propiedades de las aleaciones de aluminio son mejoradas con la adición de elementos aleantes, control durante el enfriamiento, tratamientos termomecánicos, entre otros. La ruta de

<sup>5</sup> Dumitraschkewitz, P., Uggowitzer, P.J., Gerstl, S.S.A. *et al.* Size-dependent diffusion controls natural aging in aluminium alloys. *Nat Commun* **10**, 4746 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41467-019-12762-w>

<sup>6</sup> Evangelia Georgantzia, et al. Aluminium alloys as structural material: A review of research. *Engineering Structures*, **227**, 111372 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2020.111372>.

preparación juega un papel importante, para la obtención de buenas propiedades mecánicas, es conveniente un cuidadoso control tanto en la contracción durante la solidificación como en el oxígeno disuelto durante la fundición para contrarrestar la presencia de microporosidad, que tiende a aumentar el tamaño de grano. Adicionalmente, las aleaciones metálicas y los compuestos de matriz metálica reforzados con partículas (sóluto) presentan mayor resistencia mecánica, elevada conductividad térmica y mayor estabilidad dimensional. La adición de partículas al metal fundido, introduce un número mayor de sitios de nucleación y reduce el subenfriamiento, acelerando por lo tanto, el proceso de solidificación.

### Conclusiones

Enfriados con suficiente rapidez y lejos de la temperatura crítica, casi todos los materiales, podrían ser transformados en sólidos amorfos. Una elevada velocidad de enfriamiento, provoca un subenfrimiento en el líquido que conlleva a la nucleación lejos de las condiciones de equilibrio y permite la obtención de sólidos con macroestructuras y propiedades diferentes a las obtenidas a velocidades de enfriamiento convencional.