

### Mirando hacia atrás

Alberto Galindo Tixaire

#### Cien años de RSEFQ

Cuando se creó la RSEFQ en 1903 ni la relatividad ni la mecánica cuántica habían visto la luz. Más de medio siglo después asistí a mi primera bienal.<sup>1</sup> Tuvo lugar en Granada, en 1959. Era la IX Bienal. Dos comunicaciones, una sobre simetrías discretas P, C y T en teoría de campos, presentada por Pedro Pascual de Sans, y otra sobre el análisis de la teoría de colisiones en espacios de Hilbert, presentada por quien escribe estas reflexiones, inauguraban, creo, la presencia formal de la mecánica cuántica en los congresos nacionales. Por primera vez había una sesión dedicada a la Física Teórica.<sup>2</sup>

Hoy, casi medio siglo más tarde, la física goza en España de un empuje que, si bien notable en ciertas áreas, es aún insuficiente para nuestro peso económico. Las administraciones, central y autonómica, parecen ignorar la importancia de la investigación en ciencia para el desarrollo sostenido y la competitividad del país, mientras las autoridades universitarias dan escasas muestras de firmeza o convencimiento a la hora de defender ante aquellas el papel central de la ciencia en las universidades que gobiernan, aceptando unos presupuestos y proyectos de plantillas absolutamente sesgados hacia la docencia en detrimento de la investigación. Los jóvenes estudiantes huyen de unas carreras científicas difíci-



Secciones meridianas de los orbitales  $3S\ M_z=0$ ,  $3P\ M_z=0$  y  $3P\ M_z=\pm 1$  de un electrón en un átomo de Hidrógeno

les y de horizontes inciertos, asustados al ver que en los departamentos abundan excelentes investigadores en larga lista de espera para lograr un puesto de profesor o un contrato digno. Si esto no se corrige pronto, nuestro retroceso científico estará servido.

Hace dos años tuvimos la ocasión de celebrar desde esta misma revista el centenario de los quanta. Las contribuciones entonces recogidas fueron solo una pequeña muestra de la variedad investigadora que hay en nuestro país. Ya entonces lamenté<sup>3</sup> la ausencia de muchas de las áreas en que la física cuántica incide de modo esencial, entre ellas, la óptica Cuántica, la Física Atómica y Molecular, y la Física Nuclear. Afortunadamente están aquí ahora, con autores que aportan riguroso testimonio del empuje en esos campos.

Así, la Prof. M.L. Calvo repasa con dominio a la par que afecto el desarrollo de la óptica en España hasta mediados del XX, rindiendo merecido recuerdo a quienes, en tiempos difíciles, prepararon el camino que lleva a la situación actual.

La Dra. P. García presenta un documento muy completo sobre la investigación realizada con láseres en nuestro país, desde 1975.

El Prof. L. Roso ofrece una apretada panorámica de los dispositivos fotónicos (fibras, cristales fotónicos, etc.) y su posible futuro.

<sup>1</sup>He podido encontrar información detallada de las bienales IV, V, VI, VIII, y siguientes; de la I (1930, Sevilla), II (1932, Barcelona), III (1940, Zaragoza), y VII (1955, Valencia), solo resúmenes de las mismas a través de los Anales. Aunque ya lo sabía, me ha entristecido constatar la ausencia de figuras como B. Cabrera, M.A. Catalán, S. Velayos, y otros, no sólo “borrados” por la censura franquista tras la guerra civil, sino también oficialmente ignorados por quienes regían entonces los destinos de la RSEFQ.

<sup>2</sup>Dos años antes, en la VIII Bienal celebrada en Santiago de Compostela, Luis María Garrido Arilla había presentado una ponencia sobre el cálculo de fuerzas nucleares a través del propagador de Green de dos cuerpos, en la sesión sobre Física Nuclear y Electricidad. En cuanto a los Anales, el primer trabajo de investigación que encuentro en el que aparece la ecuación de Schrödinger es de 1957, dentro de una comunicación también de Garrido sobre el acoplamiento fuerte. Sin embargo, por lo que respecta a monografías y libros escritos por españoles sobre temas cuánticos, ya en 1932 Julio Palacios Martínez centraba su loable discurso de ingreso en la Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales en la mecánica *cuantista*, y algo después Fernando Ramón Ferrando escribía la memoria *Los cuantos de acción* (Anales de la Universidad de Valencia, Año XIV-12, 1934). Loable es la traducción, por Xavier Zubiri Apalategui, del curso impartido por Schrödinger en la Universidad de Verano de Santander, publicada como *La Nueva Mecánica Ondulatoria* (Signo, Madrid 1935). Más tarde, en 1943 Esteban Terradas Illa incluía en su obra *Lecciones sobre Física de Materiales Sólidos* (Academia General de Ingenieros Aeronáuticos, Madrid 1943, 1945) cuatro lecciones sobre la Mecánica Ondulatoria, concisas, pero muy claras, y en el curso 1944-45 Francisco Navarro Borrás añadía a su monumental programa regular de Mecánica Teórica, impartido en la Universidad de Madrid, una parte final dedicada a la “Nueva Mecánica” (*Lecciones de Mecánica Teórica*, Notas de Clase tomadas por los alumnos y autorizadas por el profesor). En 1949 apareció el libro *Mecánica Cuántica* (Memorias de la Academia de Ciencias de Zaragoza, Serie 2ª, Memoria 2ª) de José María Iñiguez Almech, obra pionera en nuestro país que recoge sus clases de doctorado de los cursos 1946-48 en la Universidad de Zaragoza. De 1947 es el encomiable libro *Esquema físico del mundo* (Alcor, Madrid 1947), de Julio Palacios Martínez, con una segunda parte dedicada a “La cuantización de la mecánica”, seguida de una tercera sobre “Causalidad”, en la que discutía las variables ocultas. En 1948 aparecía *Introducción a la teoría corpuscular de la luz* (CSIC, Monografías de Ciencia Moderna nº 13), memoria en que Ramón Ortiz Fornaguera exponía las bases de la Electrodinámica Cuántica; por último, de 1949 es el libro *Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica* (Instituto “Jorge Juan”, Monografías de Matemática, I, Madrid 1949), admirable traducción al español por Ortiz del clásico libro de János László von Neumann *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* (Springer, Berlin 1932).

<sup>3</sup>A. Galindo, *Cien años de quanta*, Revista de Física **14**, 1-3, 2000.

La contribución del Prof. I. Cirac y de los Drs. J.J. García-Ripoll y B. Paredes es una elegante muestra de la potencialidad de los condensados de Bose-Einstein rotantes para crear y manipular *anyons* o cuasipartículas de estadística fraccionaria.

Los Prof. G. Delgado-Barrio y P. Villarreal pasan revista muy completa y actual a los cálculos *ab initio* de alto nivel de estructuras electrónicas y a los métodos basados en el funcional de la densidad; el problema del déficit del ozono, el efecto Efimov en trimeros de  $^4\text{He}$ , la femtofísica y el control de mecanismos de reacción son también objeto de su atención.

**Hoy, la física goza en España de un empuje que, si bien notable en ciertas áreas, es aún insuficiente para nuestro peso económico.**

Tras resumir los avances logrados en la física de los átomos, tanto desde un punto de vista fundamental como aplicado, el Prof. L.C. Balbás hace un meritorio resumen de la teoría del funcional de la densidad y su incidencia en la Física Atómica.

El Prof. J.L. Egido y el Dr. A. Jungclauss describen con claridad el progreso en la Física Nuclear durante la última década, centrándose en los núcleos exóticos (muy alejados del valle de estabilidad) y en los núcleos ordinarios pero en condiciones exóticas (altas excitaciones, momentos angulares y/o deformaciones).

Los fundamentos cuánticos se asoman, una vez más perturbadores, de la mano del Prof. J.L. Sánchez: colapso, variables ocultas, etc.; aunque hay otras cuestiones en mecánica cuántica, que son, para muchos, tan básicas o más, y que ya en 1959 y principios de los 60 estábamos empeñados en esclarecer.

Y finalmente, el Prof. J. Tejada discute con brillantez algunos aspectos notables y novedosos del efecto túnel macroscópico en imanes nanométricos como los agregados moleculares de alto spin: interferencia cuántica, coherencia cuántica de spin, y superradiancia.

Buceando el otro día por los archivos de la RSEF, ví que en sus Anales había una publicación de Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger: *¿Son lineales las verdaderas ecuaciones del campo electromagnético?* (Anales de la Sociedad Española de Física y Química, Vol. XXXIII, 511-517

(1935)).<sup>4</sup> No era sobre su ecuación, sino acerca de la linealidad de las ecuaciones de Maxwell en vacío, que él ponía en duda.<sup>5</sup>

Hoy sabemos que la electrodinámica clásica fuera de medios materiales presenta no-linealidades inducidas por fenómenos cuánticos virtuales en el vacío. Pero no era este el argumento de Schrödinger, sino otro poco creíble, sugerido por analogía con la teoría del sonido.

El caso es que el hallazgo de tan insigne presencia en los Anales me sugirió tomar a Schrödinger, y en particular, a su ecuación, como tema de encuentro con los contribuyentes a este volumen.

## La ecuación de Schrödinger, ayer y hoy

Refiriéndose al trabajo histórico de Schrödinger *Quantisierung als Eigenwertproblem*, Annalen der Physik **79**, 361-376, 489-527 (1926), **80**, 437-490 (1926), **81**, 109-139 (1926), escribe Max Jammer: *Schrödinger's brilliant paper was undoubtedly one of the most influential contributions ever made in the history of science*. El propio Einstein lo ensalzó con entusiasmo, viendo en él la prueba de que los fenómenos cuánticos no obligaban a renunciar al continuo, puesto que una ecuación diferencial (prototipo de continuidad) sobreterminada podía revelar aspectos discretos. Y Born dijo de la obra cumbre de Schrödinger: *Was gibt es Großartigeres in der theoretischen Physik als seine ersten sechs Arbeiten zur Wellenmechanik*.

Así escribió Schrödinger su ecuación para el átomo de hidrógeno en la primera de las citadas publicaciones:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{K^2} \left( E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0.$$

donde  $K = h/2\pi$  para que el espectro ligado resultante conduzca a los niveles de Bohr.<sup>6</sup> Hasta la cuarta entrega no introduce Schrödinger su ecuación dependiente del tiempo

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{h}{4\pi i} \left( \Delta - \frac{8\pi^2}{h^2} V \right) \psi.$$

La sustitución  $E \rightarrow -i\hbar\partial_t$  le obliga a partir de ese momento a admitir por vez primera que la función de ondas  $\psi$  puede ser compleja.<sup>7,8</sup>

<sup>4</sup> Supongo que se trata del texto traducido de alguna conferencia impartida en España por el ilustre vienés.

<sup>5</sup> En ese mismo año se demostró (H. Euler y B. Kockel, Naturwiss. **23**, 246 (1935)) que la polarización cuántica del vacío (interacción luz-luz en nuestro caso) induce correcciones a la permitividad y permeabilidad del espacio libre que dependen cuadráticamente del campo electromagnético; su orden de magnitud es  $10^{-1}\alpha^{-1} \max(E^2, B^2)/E_0^2$ , donde  $E_0 = e/r_e^2$  con  $r_e$  el radio clásico del electrón. Por tanto solo son importantes a escala atómica. (Ver J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2ª edición, Wiley, Nueva York 1975.)

<sup>6</sup> Esa ecuación, y su extensión al caso de un potencial estático  $V$  arbitrario, que figura en un añadido durante la corrección de pruebas de su primer entrepunto, las obtiene Schrödinger como consecuencia de un principio variacional aplicado a la integral de Hamilton.

<sup>7</sup> Cuenta Dirac en su nota necrológica sobre Schrödinger que, según le había confesado este mismo, antes de alumbrar su ecuación había aplicado al átomo de hidrógeno lo que hoy conocemos como ecuación de Klein-Gordon:  $[(E + \alpha/r)^2 - \mathbf{p}^2 - m_e^2]\psi = 0$ , en unidades naturales ( $\hbar = c = 1$ ). La estructura fina del espectro resultante para un átomo hidrogenoide de carga  $Ze$ ,

$$E_n / m_e c^2 = \left[ \left( 1 + (Z\alpha)^2 \left[ n - l - \frac{1}{2} + \sqrt{(l + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2} \right]^{-2} \right)^{-1/2} - 1 \right]$$

aunque muy adecuada a los átomos piónicos y kaónicos (tras incluir correcciones obligadas por masa y tamaño finito del núcleo, y por la interacción fuerte mesón-núcleo), no lo es para el hidrógeno, pues no tiene en cuenta el spin del electrón. Por eso Schrödinger abandonó el proyecto durante unos meses.

<sup>8</sup> El lector avezado habrá observado que la elección  $E \rightarrow -i\hbar\partial_t$  no tiene el signo usual. De hecho, Schrödinger usó en ese trabajo el doble signo a lo largo de unas páginas, pero ya en la página 137 elige el arriba citado, que mantendrá en posteriores publicaciones y conferencias. Ver, por ejemplo, su trabajo *Energieaustausch nach der Wellenmechanik*, Annalen der Physik **83**, 956-968 (1927) —que con los cuatro ya citados y otros recoge el libro: E. Schrödinger, *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, Johann Ambrosius Barth, Leipzig 1928— y el texto de la sección *Derivation of the wave equation (properly speaking) which contains the time*, en la segunda de sus conferencias recogidas en el volumen: E. Schrödinger, *Collected Papers on Wave Mechanics*, 176-177, Chelsea, New York 1982.



Erwin Schrödinger (1887-1961)

Con razón se dice que la ecuación de Schrödinger ha sido la ecuación más fértil de la física en el siglo XX:<sup>9</sup> átomos, moléculas, núcleos, materia condensada, física de superficies, óptica cuántica, microelectrónica, información cuántica, y un largo etcétera, son campos donde se ha echado mano de esa ecuación con mayor o menor intensidad. Sus propiedades matemáticas (análisis espectral, perturbaciones, completitud asintótica, estabilidad de primera y segunda especie para materia fermiónica en el límite  $N \rightarrow \infty$ , inestabilidad de segunda especie para la materia bosónica, etc.) han ocupado un importante espacio en la física matemática de las últimas décadas. Y todavía quedan importantes cuestiones por dilucidar. En cuanto a los problemas que plantea su aplicación directa, y posibles alternativas que se han propuesto, citemos como muestra:

1. El cálculo de espectros en átomos y iones multielectrónicos.<sup>10</sup> La precisión alcanza sus más altas cotas cuando el número de electrones es  $\leq 3$ .<sup>11</sup> Ejemplo: la energía fundamental del Hamiltoniano no relativista  $-(1/2)(\Delta_1 + \Delta_2) - 2(r_1^{-1} + r_2^{-1}) + r_{12}^{-1}$  asociado al átomo de He se ha calculado con precisión de 1 parte en  $10^{19}$ :  $E_0 = -2.903\,724\,377\,034\,119\,598\,13(23)$ . Para sistemas atómicos más complejos, se recurre a técnicas de cálculo menos precisas (Hartree-Fock, Monte Carlo, etc.).
2. Heitler y London (1927) fueron los primeros en analizar cuánticamente la molécula más simple,  $H_2$ , obteniendo una energía de enlace de 3.14 eV (el valor experimental es 4.75 eV), y una distancia internucleónica de 0.87 Å (fren-

te a su valor experimental de 0.740 Å). El cálculo directo de moléculas, por muy sencillas que sean, puede suponer un desafío insuperable. Si la molécula tiene  $N$  núcleos y  $Z$  electrones, su función de ondas depende de  $3(N+Z)$  variables (ignorando spines). Aunque sólo tomásemos 10 puntos en cada recta, el número de puntos a considerar sería  $10^{3(N+Z)}$ , superior al de nucleones en el Universo visible en cuanto  $N+Z > 26$ . ¿Cómo almacenar, por tanto, esta información?<sup>12</sup> Kohn habla de “muro exponencial” refiriéndose a este crecimiento de la complejidad del problema con el número de partículas.

**La ecuación de Schrödinger ha sido la ecuación más fértil de la física en el siglo XX.**

Para brincar esta pared, se ha propuesto un método alternativo a la ecuación de Schrödinger, conocido como el método del funcional de la densidad (Hohenberg y Kohn, 1964, Kohn y Sham, 1965),<sup>13</sup> que permite abordar el análisis cuantitativo de moléculas complejas y agregados de hasta varios centenares de electrones.<sup>14</sup> En este método la función de onda multielectrónica  $\Psi(\mathbf{x}_1, \sigma_1, \dots, \mathbf{x}_N, \sigma_N)$  deja paso a la densidad

$$n(\mathbf{x}) := N \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \int d^3x_2 \dots d^3x_N |\Psi(\mathbf{x}_1, \sigma_1, \dots, \mathbf{x}_N, \sigma_N)|^2$$

de electrones, y la búsqueda de un estado y energía fundamentales del sistema atómico o molecular en un potencial externo  $V_{\text{ext}}$  se traslada a minimizar el funcional de la densidad de Hohenberg-Kohn

$$E_{V_{\text{ext}}}[\bar{n}(\cdot)] := \int d^3x V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) \bar{n}(\mathbf{x}) + F[\bar{n}(\cdot)] := \min_{\bar{\Psi} \in \mathcal{H}_{\bar{n}(\cdot)}} \langle (K + V_{\text{int}}) \rangle_{\bar{\Psi}},$$

donde  $\mathcal{H}_{\bar{n}(\cdot)}$  es el subespacio de Hilbert formado por las funciones de onda multielectrónicas conducentes a  $\bar{n}(\cdot)$ . La complejidad del problema inicial de  $N$  cuerpos se ha refugiado ahora en  $F[\bar{n}(\cdot)]$ . Escribiendo

$$K[\bar{n}(\cdot)] := \min_{\bar{\Psi} \in \mathcal{H}_{\bar{n}(\cdot)}} \langle K \rangle_{\bar{\Psi}},$$

$$E_{\text{xc}}[\bar{n}(\cdot)] := \min_{\bar{\Psi} \in \mathcal{H}_{\bar{n}(\cdot)}} \langle V_{\text{int}} \rangle_{\bar{\Psi}} - \frac{1}{2} \int d^3x d^3x' \frac{\bar{n}(\mathbf{x}) \bar{n}(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}$$

las ecuaciones de Euler-Lagrange conducen al sistema auto-consistente de Kohn-Sham

<sup>9</sup> Movido por el impresionante éxito para el átomo de hidrógeno de la ecuación de Schrödinger y de su ampliación relativista debida a Dirac, llevó a este último a afirmar en 1929: *The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved*. Es, como dice Pople, una doble exclamación de triunfo y desesperanza.

<sup>10</sup> S. Datz *et al.*, *Atomic Physics*, Rev. Mod. Phys. **71**, S223-S241 (1999).

<sup>11</sup> La estructura fina en iones bielectrónicos no demasiado ligeros reclama la sustitución de la ecuación (no relativista) de Schrödinger por la ecuación (relativista) de Dirac, ya que el desarrollo en potencias de  $Z\alpha$  deja de ser aconsejable en esos sistemas cuando  $(Z\alpha)^2 > Z^{-1}$ , esto es, para  $Z \geq 27$ .

<sup>12</sup> Manin cita este párrafo de Poplavskii (1975): *The quantum-mechanical computation of one molecule of methane requires  $10^{42}$  grid points. Assuming that at each point we have to perform only 10 elementary operations, and that the computation is performed at the extremely low temperature  $T = 3 \times 10^{-3} K$ , we would still have to use all the energy produced on Earth during the last century.*

<sup>13</sup> Ver W. Kohn, *An essay on condensed matter physics in the twentieth century*, Rev. Mod. Phys. **71**, S59-S77 (1999), *Nobel Lecture: Electronic structure of matter-wave functions and density functionals*, Rev. Mod. Phys. **71**, 1253-1266 (1999).

<sup>14</sup> La complejidad exponencial de la resolución de la ecuación de Schrödinger se reduce a complejidad polinómica, tendente a lineal, en la formulación a través del funcional de la densidad.



$$\left(-\frac{1}{2}\Delta + V_{\text{ef}}(\mathbf{x}) - \varepsilon_j\right)\phi_j(\mathbf{x}) = 0,$$

$$n(\mathbf{x}) = \sum_{1 \leq j \leq N} |\phi_j(\mathbf{x})|^2,$$

$$V_{\text{ef}}(\mathbf{x}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + \int d^3x' \frac{n(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} + V_{\text{xc}}(\mathbf{x}),$$

versión *exacta* de la técnica de Hartree-Fock. El difícil problema de los  $N$  electrones en interacción mutua y en el campo coulombiano de los núcleos se ha transformado en un problema de  $N$  electrones sin interacción mutua, moviéndose todos en un mismo potencial efectivo. En las expresiones anteriores,  $E_{\text{xc}}[\bar{n}(\cdot)]$  se llama funcional de intercambio/correlación, y

$$V_{\text{xc}}(\mathbf{x}) := \left( \frac{\delta}{\delta \bar{n}(\mathbf{x})} E_{\text{xc}}[\bar{n}(\cdot)] \right)_{\bar{n}(\cdot)=n(\cdot)}$$

es el potencial asociado de intercambio/correlación. Los valores propios  $\varepsilon_1 \leq \dots \leq \varepsilon_N$  son los más bajos del espectro (ordenado y con multiplicidades incluidas) de  $-(1/2)\Delta + V_{\text{ef}}$ . La energía fundamental viene dada por

$$E_0 = \sum_j \varepsilon_j - \frac{1}{2} \int d^3x d^3x' \frac{n(\mathbf{x})n(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - \int d^3x V_{\text{xc}}(\mathbf{x}) n(\mathbf{x}) + E_{\text{xc}}[n(\cdot)].$$

El ingenio físico se ejercita en la aproximación juiciosa del funcional “divino”  $E_{\text{xc}}[\bar{n}(\cdot)]$ .<sup>15</sup> Su conocimiento preciso permitiría realizar el cálculo exacto de la densidad electrónica. La aproximación más familiar es la aproximación de densidad local (LDA), que permite calcular energías de ionización y disociación con precisiones de un 10% – 20%, y longitudes de enlace con errores del orden de un 1%. La LDA es “madre” de mejores aproximaciones, como la de gradiente generalizado (GGA), y la de funcionales híbridos, ampliamente utilizadas en química cuántica.

**Kohn habla de “muro exponencial” refiriéndose a este crecimiento de la complejidad del problema con el número de partículas. El método del funcional de la densidad permite abordar el análisis cuantitativo de moléculas complejas y agregados de hasta varios centenares de electrones.**

Existen problemas, sin embargo, como aquellos en que intervienen superficies, en los que la teoría del funcional de densidad ha tenido poco éxito por ahora.

El análisis denominado *ab initio* de moléculas pequeñas (menos de 50 electrones) es posible, mediante técnicas

Hartree-Fock e interacción de configuraciones, con precisión para las energías rozando la experimental (1 kcal/mol, es decir, 0.04 eV), gracias a la velocidad y memoria de los ordenadores actuales.<sup>16</sup>

3. La estructura y estabilidad de los núcleos muy ligeros ( $A \leq 4$ ) y sus reacciones se analizan resolviendo la ecuación de Schrödinger con potenciales internucleónicos complicados, consecuencia del intercambio de mesones.<sup>17</sup> No basta con las fuerzas entre pares de nucleones; hay que incluir también fuerzas entre ternas de ellos.<sup>18</sup> Al aumentar  $A$  se hace preciso recurrir a otros métodos, como el de MonteCarlo (para  $A \leq 7$ ) y el de Hartree-Fock.

4. En el estudio de condensados atómicos de Bose-Einstein, en trampas armónicas y régimen diluido, la aproximación de campo medio para el parámetro de orden del gas de bosones resulta ser notablemente eficaz desde el punto de vista cuantitativo.<sup>19</sup> Precisemos. Sea

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left( -\frac{1}{2}\Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \int d^3x d^3x' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{x}') V_{\text{int}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \hat{\Psi}(\mathbf{x}') \hat{\Psi}(\mathbf{x})$$

el hamiltoniano de un campo bosónico  $\hat{\Psi}$  no relativista de masa  $m$ , confinado en una trampa, donde: 1)  $V_{\text{ext}}$ , potencial externo producido por la trampa, es localmente acotado y tiende a infinito cuando  $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ . Desplazando convenientemente el origen de energías, supondremos que  $\min V_{\text{ext}} = 0$ . 2) Los bosones interactúan entre sí a través de un potencial  $V_{\text{int}}$  de simetría esférica, que es de corto alcance (decrece a grandes distancias más deprisa que  $|\mathbf{x}|^{-3}$ ), y tiene una longitud de difusión  $a$  finita en onda  $s$ . 3) Elegimos unidades en que  $\hbar = m = 1$ .

La restricción de  $\hat{H}$  al espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_N$  de  $N$  bosones es

$$H_N := \hat{H} \upharpoonright \mathcal{H}_N = \sum_1^N \left( -\frac{1}{2}\Delta_j + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}_j) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} V_{\text{int}}(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|).$$

Supongamos que: 1) La temperatura es suficientemente baja de modo que la condensación de átomos sea prácticamente total. 2) El gas es diluido, en el sentido de que las distancias interatómicas son mucho mayores que el módulo de la longitud de difusión  $a$  en onda  $s$  bajo el potencial interatómico  $V_{\text{int}}(|\mathbf{x}|)$ :  $n|a|^3 \ll 1$ , donde  $n$  es la densidad de bosones.<sup>20</sup> Entonces los bosones colisionan entre sí a muy baja energía y el potencial es simulable por un potencial de contacto  $V_{\text{int}}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|) \approx g\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ , donde  $g := 4\pi a$ , y la función de onda o parámetro de orden  $\Phi := \langle \hat{\Psi} \rangle$  satisface en excelente aproximación una versión efectiva y no-lineal de la ecuación

<sup>15</sup>A.E. Mattsson, *In Pursuit of the “Divine” Functional*, Science **298**, 759-760 (2002).

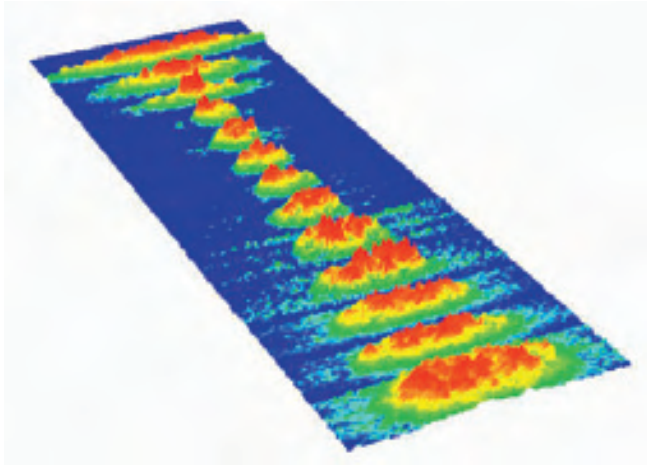
<sup>16</sup>Ver J.A. Pople, *Nobel Lecture: Quantum chemical models*, Rev. Mod. Phys. **71**, 1267-1274 (1999).

<sup>17</sup>Como prueba de su actualidad, bástenos citar que con ella acaba de probarse (R. B. Wiringa and Steven C. Pieper, *Evolution of Nuclear Spectra with Nuclear Forces*, Phys. Rev. Lett. **89**, 182501 (2002)) algo tan básico como que las componentes de spin, isospin y tensoriales de las fuerzas internucleónicas son las responsables de la ausencia de núcleos estables con  $A=5$ , 8, y por tanto de la limitación a núcleos ligeros de la cosmonucleosíntesis primigenia.

<sup>18</sup>E.M. Henley y J.P. Schiffer, *Nuclear physics at the end of the century*, Rev. Mod. Phys. **71**, S205-S219 (1999).

<sup>19</sup>Ver F. Dalfovo et al., *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71**, 463-512 (1999).

<sup>20</sup>Valores típicos:  $n \sim 10^{13} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ,  $|a| \sim 1 - 6 \text{ nm}$ , por lo que  $n|a|^3 \leq 10^{-3}$ .



**Focalización de nubes de gas ultrafrío y formación de condensados BE en estados de no-equilibrio.**

ción de Schrödinger, conocida como ecuación de Gross-Pitaevskii (Gross 1961, 1963, Pitaevskii 1961):

$$i\partial_t \Phi(\mathbf{x}, t) = \left[ -\frac{1}{2} \Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + g|\Phi(\mathbf{x}, t)|^2 \right] \Phi(\mathbf{x}, t)$$

Además,  $|\Phi(\mathbf{x}, t)|^2$  representa la densidad bosónica y por tanto se tiene la condición de normalización  $\int d^3 x |\Phi(\mathbf{x}, t)|^2 = N$ .

En versión estacionaria,  $\Phi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}) e^{-i\mu t}$ , y

$$\left[ -\frac{1}{2} \Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + g|\phi(\mathbf{x})|^2 \right] \phi(\mathbf{x}) = \mu \phi(\mathbf{x}),$$

donde  $\mu$  es el potencial químico. Esta ecuación expresa la estacionariedad del funcional de energía de Gross-Pitaevskii

$$E[\phi] := \int d^3 x \left[ \frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + V_{\text{ext}} |\phi|^2 + \frac{1}{2} g |\phi|^4 \right],$$

con la condición  $\int d^3 x |\phi(\mathbf{x})|^2 = N$ . Los sumandos representan la energía cinética  $E_c$ , la energía potencial  $E_{\text{ext}}$  en la trampa, y la energía de interacción mutua  $E_{\text{int}}$ . Es claro que  $\mu = (E_c + E_{\text{ext}} + 2E_{\text{int}})/N$ .

Lieb y colaboradores han logrado sentar rigurosamente las bases de la ecuación de Gross-Pitaevskii.<sup>21</sup> Concretamente, si  $V_{\text{int}}(|\mathbf{x}|)$  es repulsivo, esto es,  $V_{\text{int}} \geq 0$ , y además  $a > 0$ , entonces:

1)  $\exists! \phi_{N,a}^{\text{GP}}(\mathbf{x})$  tal que

$$E_0^{\text{GP}}(N, a) := \inf_{\int d^3 x |\phi|^2 = N} E[\phi] = E[\phi_{N,a}^{\text{GP}}].$$

Además,  $\phi_{N,a}^{\text{GP}} \geq 0$  y  $C^1$ .

2) Sea  $E_0^{\text{QM}}(N, a)$  la energía fundamental de  $H_N$ ,<sup>22</sup>  $\Psi_0^{\text{QM}} \geq 0$  su estado fundamental normalizado, y

$$n_{N,a}^{\text{QM}} := N \int d^3 x_2 \dots d^3 x_N |\Psi_0^{\text{QM}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)|^2$$

la densidad bosónica asociada. Si  $\lambda \rightarrow \infty$ ,

$$E_0^{\text{QM}}(\lambda N, a/\lambda) / E_0^{\text{GP}}(\lambda N, a/\lambda) \rightarrow 1,$$

$$\lambda^{-1} n_{\lambda N, a/\lambda}^{\text{QM}} \rightarrow |\phi_{N,a}^{\text{GP}}|^2,$$

siendo la última convergencia en sentido  $L^1$  débil.

Nótese que al tender  $\lambda \rightarrow \infty$  el gas es cada vez más diluido:  $na^3 \mapsto \lambda^{-2} na^3$ .

3) Sea  $\gamma_{N,a}^{\text{QM}}$  la matriz densidad de una partícula, con núcleo

$$\gamma_{N,a}^{\text{QM}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') :=$$

$$N \int d^3 x_2 \dots d^3 x_N \Psi_0^{\text{QM}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \Psi_0^{\text{QM}}(\mathbf{x}', \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$$

Entonces, si  $\lambda \rightarrow \infty$ ,

$$(\lambda N)^{-1} \gamma_{\lambda N, a/\lambda}^{\text{QM}} \rightarrow |\phi_{1, Na}^{\text{GP}} \rangle \langle \phi_{1, Na}^{\text{GP}}|$$

en norma de traza. En otras palabras, en el límite considerado ( $N \rightarrow \infty$ , y alcance del potencial tendiendo a 0, de modo que  $Na = \text{const.}$ ), el estado fundamental del gas bosónico atrapado es un condensado Bose-Einstein al 100%.

*La función de onda o parámetro de orden de un gas bosónico frío y diluido satisface, en excelente aproximación, una versión efectiva y no-lineal de la ecuación de Schrödinger, conocida como ecuación de Gross-Pitaevskii.*

## Final del proemio

Deseo agradecer a Cristóbal Fernández Pineda y a Antonio Moreno González por la información histórica relevante que me han suministrado. Concluyo con el deseo de que nuestra Real Sociedad Española de Física siga creciendo, robusta y esperanzada. Y nada mejor, como broche, que aquellas palabras con las que Henry Rowland, primer Presidente de la American Physical Society, concluía su alocución inaugural en 1899:

*Sigamos adelante, por tanto, confiados en la dignidad de nuestra búsqueda. Mantengamos erguidas nuestras cabezas con la conciencia limpia mientras perseguimos la verdad...*

<sup>21</sup>E.H. Lieb et al., *The Ground State of the Bose Gas*, arXiv:math-ph/0204027.

<sup>22</sup>Suponemos que el cambio de  $a \rightarrow a'$  en  $H_N$  proviene de cambiar el potencial  $V_{\text{int}}(\mathbf{x}) \rightarrow (a/a')^2 V_{\text{int}}(a\mathbf{x}/a')$ .