

“Caos cuántico”... no es una *Scary* *Movie*

Luis Seidel

Rosa M^a Benito

Florentino Borondo*

Grupo de Sistemas Complejos (GSC)

Universidad Politécnica de Madrid (UPM)

*Universidad Autónoma de Madrid

—¿Caos?, ¿Caos Cuántico?, ¿a eso os dedicáis? ... suena espeluznante.

Comentarios en este tono no son infrecuentes para los oídos de los investigadores del Grupo de Sistemas Complejos (GSC) de la Universidad Politécnica de Madrid. Una de las líneas de investigación más activas de este Grupo se lleva precisamente en esta área: *Caos cuántico*.

Vamos a intentar aclarar en los párrafos que siguen que el estudio del caos cuántico no es una película de terror. Tampoco es una cosa de broma: si en la conocida serie de películas *Scary Movie* se parodiaba a los clásicos del terror cinematográfico, en el estudio del caos cuántico encontraremos sorprendentes implicaciones entre ramas muy distintas de la Física y las Matemáticas y aplicaciones en campos como la Nanotecnología o los Microláseres.

Un paseo de la mano de los pioneros

Pongámonos en el papel de Mr. Tompkins, el personaje creado por el físico ruso George Gamow, cuyas aventuras en mundos alejados de la intuición cotidiana sirvieron para popularizar en los años 1930 la teoría de la relatividad y la mecánica cuántica. Nuestra historia comienza cuando Mr. Tompkins, hipotéticamente, conoce a Poincaré.

Henri Poincaré, matemático, físico teórico y uno de los últimos *sabios universales*, formado como ingeniero en la École Polytechnique, trabajó muchos años como ingeniero de minas. Es conocido como el padre de la teoría del caos. Su trabajo seminal en este campo le sirvió para ganar el premio que había convocado el rey Oscar II de Suecia en 1887. Este premio se otorgaría a quien resolviera, en un sentido matemático preciso, el llamado *problema de los N cuerpos*, escollo contra el que se habían estrellado las mentes más preclaras desde Newton. Estaba en juego la estabilidad del sistema solar. El problema de los dos cuerpos —por ejemplo, el Sol y un planeta— estaba resuelto desde Kepler, y también se conocían algunas soluciones particulares del problema de 3 cuerpos —como la de Lagrange, que establece la existencia de puntos estables bajo la influencia del Sol y otro planeta, y que se han utilizado en algunas misiones espaciales muy recientes—. Sin embargo, las demostraciones generales se resistían. De hecho, Poincaré no resolvió el *problema de los N cuerpos*, sin embargo, los métodos que utilizó para atacarlo iniciaron una nueva era en la Mecánica Celeste, que desembocaría además en los años 1960 en el desarrollo de la *Teoría del Caos*.

La intuición pionera de Poincaré mostró la importancia de algunos objetos invariantes en la evolución de los sistemas dinámicos que, como el problema de los tres cuerpos, se conocen como no integrables. En primer lugar, son fundamentales las *órbitas periódicas*, trayectorias que vuelven sobre sí mismas de manera perpetua. De ellas escribió Poincaré: “*lo que las hace tan preciosas para nosotros es que son, por así decirlo, la única brecha por la que podemos penetrar en una*

fortaleza hasta ahora inatacable". Las órbitas periódicas, que pueden ser estables o inestables, se asocian con nuestra idea de regularidad. En el otro extremo se encuentra la *maraña homoclina* (homoclinic tangle), una red inimaginablemente compleja de autointersecciones de variedades asintóticas invariantes que surgen de las órbitas periódicas inestables. Poincaré ni se atrevió a dibujar esa maraña, y por supuesto no tenía herramientas de cálculo para hacerlo. El movimiento homoclino, gobernado por esas estructuras, puede llamarse con toda propiedad caótico. Poincaré había encontrado el origen del caos.

Antes de que aterricemos al lector interesado, demos un salto hacia delante de un siglo. Podemos resumir los avances en la teoría del caos en ese siglo XX: desarrollo de herramientas computacionales para simular numéricamente y visualizar los movimientos caóticos; fundamentación de la teoría de sistemas dinámicos, el *efecto mariposa*... Finalmente, se consiguió caracterizar de manera satisfactoria el caos clásico. La propiedad matemática que define un sistema dinámico caótico es la extrema sensibilidad a las condiciones iniciales. Esto tiene consecuencias muy importantes, ya que hace que el comportamiento del sistema sea impredecible, aunque su evolución sea determinista.

Mientras tanto, se había producido otra revolución en la Física: la Mecánica Cuántica. Los primeros desarrollos de la teoría cuántica estuvieron muy ligados a la Mecánica Clásica. Se desarrollaron *reglas de cuantización* (como las de Bohr-Sommerfeld que explicaban el espectro del átomo de hidrógeno) como recetas *ad hoc* para obtener niveles de energía cuánticos, utilizando estructuras clásicas que sólo existen en sistemas integrables. Ya Einstein en 1917 advirtió que esas reglas no se podían aplicar a los sistemas no integrables, aquellos que estudió Poincaré. Por sorprendente que parezca esta observación no tuvo ningún eco, y así la Mecánica Cuántica, gracias sobre todo a su formulación ondulatoria, se estableció como la teoría física de más éxito en el siglo XX, explicando los espectros de átomos complicados, de moléculas, de sólidos, o el comportamiento de los quarks... Y el caos cuántico tuvo que esperar otros setenta años.

La primera definición de *caos cuántico* se debe a M. V. Berry, físico teórico de la Universidad de Bristol, que en 1987 propuso definirlo como el estudio de las manifestaciones cuánticas del caos clásico. Se empezaba a descubrir que los sistemas que son caóticos cuando son estudiados mediante la Mecánica Clásica tienen propiedades sorprendentes al ser *cuantizados*. Esta curiosa dualidad de descripciones no debe sorprendernos: en muchas áreas de la Física y la Química se emplean los métodos de la Mecánica Clásica incluso para describir movimientos microscópicos —los de los núcleos atómicos en una molécula, por ejemplo— cuando los métodos cuánticos resultan horriblemente complicados. El problema crucial es: ¿hasta qué punto existe una correspondencia entre la Mecánica Clásica y la Mecánica Cuántica en sistemas no integrables?

Volvamos al título de este artículo. *Scary* significa espeluznante, horripilante, que pone los pelos de punta. Pero tiene como raíz “*scar*” que significa: *escara, cicatriz, marca*. No hay duda de que quedaremos marcados por el caos, pero nadie imaginaba en 1984 que el caos dejaría su huella en sistemas cuánticos. En ese año, Eric Heller, de la Universidad de Harvard, acuña el término *scar* para referirse a la sorprendente concentración de la función de onda de ciertos sistemas cuánticos sobre la traza de órbitas periódicas inestables del sistema clásico asociado.

Caos en las ondas: billares y otros lugares

El sistema que estudió Heller es extremadamente sencillo: una partícula puntual que no puede salir de un recinto bidimensional, de forma que va rebotando en su borde. En otras palabras, un billar. Se había demostrado en los años 1960 que billares clásicos con distinta forma podían dar lugar a movimientos tanto regulares como completamente caóticos. En un billar rectangular —el habitual de los salones de juego que todos conocemos— se tienen movimientos regulares, por complicados que nos parezcan. En cambio, cuando se le añaden los dos semicírculos laterales y toma la forma de un estadio —el billar que estudió Heller— la dinámica clásica es completamente caótica.

La descripción cuántica u ondulatoria de un sistema está dada por la ecuación de Schrödinger. Si no estamos interesados en la evolución temporal de un sistema, podemos quedarnos con la ecuación estacionaria, cuya solución nos da los niveles de energía del sistema y sus correspondientes funciones de onda. En este sentido, los billares cuánticos son los análogos bidimensionales de los pozos de potencial unidimensionales que todo estudiante aprende a resolver en su primer curso de Mecánica Cuántica. Pero la diferencia fundamental es que la forma del borde importa, y puede cambiar completamente los resultados. Hay que pensar que en los estudios de Caos Cuántico esas soluciones estacionarias han de ser comparadas con la evolución clásica a tiempos muy largos. Así, podemos esperar que si el movimiento clásico es regular, la función de onda —que está relacionada con la probabilidad de encontrar a la partícula— deberá presentar una estructura similar. Por el contrario, si lo hace de modo caótico, explorando en su devenir (casi) toda la superficie del billar, la función de onda debería presentar una densidad uniforme. Pues bien, justo al contrario de esta predicción Heller encontró que algunas funciones de onda del estadio aparecían con escaras o cicatrices de algunas órbitas periódicas (las más cortas y menos inestables) del sistema. En resumen, la dinámica cuántica “conoce” de alguna manera las características del movimiento clásico.

Aparece ahora una de las analogías con otras áreas de la Física. La ecuación de Schrödinger estacionaria es equivalente a la ecuación de Helmholtz para la acústica que también rige las ondas electromagnéticas en el interior de una

cavidad metálica. De esta forma, estudiando billares cuánticos podemos explicar fenómenos que aparecen en las salas de conciertos, o en cavidades de microondas, caso sobre el que hay numerosos estudios experimentales. De hecho, se han patentado y comercializado microondas domésticos con el nombre de “*Chaos defrost*”: diseñando hábilmente la forma de la cavidad se puede mejorar la distribución uniforme de las microondas. También aparecen los billares en láseres en microcavidades cuya dinámica es extremadamente sensible a la forma de la cavidad; estos trabajos fueron portada de las revistas *Science* y *Nature*. Bajando aún más en la escala de longitudes, se han conseguido fabricar *corrales cuánticos*, sistemas de unos pocos átomos dispuestos con la forma de un billar, con prometedoras aplicaciones en Nanotecnología.

Pero sigamos y avancemos un paso más. Hasta ahora hemos visto cómo las funciones de onda de los billares cuánticos pueden tener una estructura muy diferente según la forma del billar. Pero ¿qué ocurre con los niveles de energía, es decir, con el espectro? Este problema se planteó en un área aparentemente muy alejada y de forma muy provocadora. En 1966, Mark Kac publicó un influyente trabajo con el título “*¿Se puede escuchar la forma de un tambor?*”. Es decir, conociendo el espectro de un tambor, se puede deducir unívocamente su forma. La cuestión, trasladada a nuestros billares es: ¿será muy distinto el espectro, o la distribución de los niveles de energía, de un billar caótico o de un billar regular? La respuesta es afirmativa, aún cuando la respuesta a la pregunta del artículo de Kac es rigurosamente no. El estudio de la distribución de los niveles de energía de un sistema cuántico es otra de las manifestaciones del caos clásico.

Moléculas triatómicas: cianuros más o menos inofensivos

Algunos de los trabajos más relevantes del GSC en este campo en los últimos años se han centrado en el estudio de sistemas moleculares triatómicos. Nos son familiares algunas moléculas triatómicas, como el agua (H_2O), el dióxido de carbono (CO_2) o el ozono (O_3). El estudio de estos sistemas presenta una notable dificultad para su estudio analítico o computacional —son problemas de tres cuerpos que se mueven en un potencial complicado—, y se sabe que su espectro vibracional —la huella digital de la molécula como sabemos por los capítulos de la serie americana *CSI*— es también muy complejo.

En el GSC se estudian moléculas triatómicas de la familia de los cianuros: $X-CN$, donde X puede ser H , Li ,... No hay que tomar demasiadas precauciones con moléculas tan venenosas porque los estudios son numéricos. Para cada uno de estos sistemas, simulamos su comportamiento desde el punto de vista clásico y resolvemos la ecuación de Schrödinger estacionaria para obtener las funciones de onda y los niveles de energía. Al preocuparnos por las trayectorias clásicas podemos decir que estamos haciendo mecánica celeste a escala microscópica y tendremos que corroborar las intuiciones de Poincaré. Pero los resultados

también tienen su interés experimental: el tiempo que dura una vibración molecular es del orden de femtosegundos (10^{-15} segundos), y en esta escala se pueden estudiar los movimientos en las reacciones químicas y “ver” como se producen, algo que le valió el premio Nobel de Química a Ahmet Zewail en 1999.

Según Rosa M^a Benito, investigadora principal del GSC, “*los sistemas moleculares triatómicos que estamos estudiando son ideales para profundizar en la correspondencia clásica-cuántica. Sus movimientos vibracionales de gran amplitud junto con la existencia de isómeros estables, hacen que desde el punto de vista clásico presenten tanto movimientos regulares como caóticos. Cuando los hemos estudiado desde el punto de vista cuántico hemos encontrado todas las huellas del caos cuántico: estados de scar entre estados regulares e irregulares y una distribución de los niveles de energía intermedia entre la que presentan los sistemas regulares y la de los completamente caóticos*”.

De hecho, en colaboración con el grupo del Prof. F. Borondo de la Universidad Autónoma de Madrid, se han realizado estudios pioneros sobre el sistema molecular LiCN. En esos trabajos, publicados en la revista *Physical Review Letters*, se encontraron por primera vez estados de *scar* asociados a una pareja de órbitas periódicas, una estable y otra inestable. Poco después junto con F. J. Arranz, investigador I3 del GSC, se estableció el mecanismo de formación de esos estados de *scar* al nivel más elemental, mostrando que pueden utilizarse para delimitar la frontera de separación entre el orden y el caos.

La repercusión de estos trabajos ha aumentado las colaboraciones internacionales del Grupo. En el curso 2007-08 se celebraron, co-organizadas por el GSC, dos reuniones internacionales. La primera (PhaSChem07) reunió expertos en la estructura del espacio de fases en la dinámica de las reacciones químicas. Se presentaron trabajos que caen en el marco de los métodos descritos pero con aplicaciones muy diversas: desde la teoría del estado de transición, que permite entender de un modo más profundo la dinámica de las reacciones químicas, hasta la formación de sistemas binarios en los asteroides del cinturón de Kuiper, más allá de Neptuno, mediante el mecanismo llamado “captura asistida por el caos”.

En la segunda reunión internacional (QChaos08), celebrada en la ETSI Agrónomos de la Universidad Politécnica de Madrid, se contó con las aportaciones de un número importante de investigadores de Argentina, como el grupo del Prof. M. Saraceno, pionero en la investigación de los llamados *mapas cuánticos* y el Prof. E. Vergini, actualmente integrado como investigador I3 en el GSC.

Podemos destacar aquí los trabajos más recientes del grupo, también publicados en *Physical Review Letters*. Con la colaboración de D. Wisniacki, de la Universidad de Buenos Aires, se ha conseguido dar un paso más en la

comprensión de los estados de *scar*. Estudiando el billar cuántico del estadio (el mismo que Heller) se ha conseguido probar que las órbitas homoclinas, aquellas que sostienen la *maraña homoclina* que asustó a Poincaré, también dejan su marca cuántica. En este caso, además, la huella no sólo queda en las funciones de onda, sino también en el espectro y en la dinámica temporal. En resumen, la extraordinaria complejidad dinámica que Poincaré vislumbró en la Mecánica Clásica va a seguir dando lugar a manifestaciones cuánticas impensadas y con gran número de aplicaciones potenciales.

Si Mr. Tompkins se hubiera encontrado realmente con Poincaré, o hiciera una visita al Grupo de Sistemas Complejos de la Universidad Politécnica de Madrid, sin duda le veríamos dando vueltas preocupado por la importancia del movimiento homoclino, y quizá lleno de “cicatrices”.

PARA SABER MÁS

- F. J. Arranz, F. Borondo, R. M. Benito, *Scar formation at the Edge of the chaotic region*, Phys. Rev. Lett. **80**, 944 (1998).
- D. A. Wisniacki, E. Vergini, R. M. Benito, F. Borondo *Signatures of Homoclinic Motion in Quantum Chaos*, Phys. Rev. Lett. **94**, 054101 (2005).
- D. A. Wisniacki, E. Vergini, R. M. Benito, F. Borondo, *Scarring by Homoclinic and Heteroclinic Orbits*, Phys. Rev. Lett. **97**, 094101 (2006).
- E. J. Heller, *Bound-State Eigenfunctions of Classically Chaotic Hamiltonian Systems: Scars of Periodic Orbits*, Phys. Rev. Lett. **53**, 1515 (1984).
- M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler, E.J. Heller, *Waves on a metal surface and quantum corrals*, Surface Rev. Lett. **2**, 127 (1995).
- M. C. Gutzwiller, *El caos cuántico*, Investigación y Ciencia **186** (marzo 1992).
- F. Borondo y R. M. Benito, *Manifestaciones Cuánticas del Caos*, Revista Española de Física **12**, 35 (1998)

FIGURAS

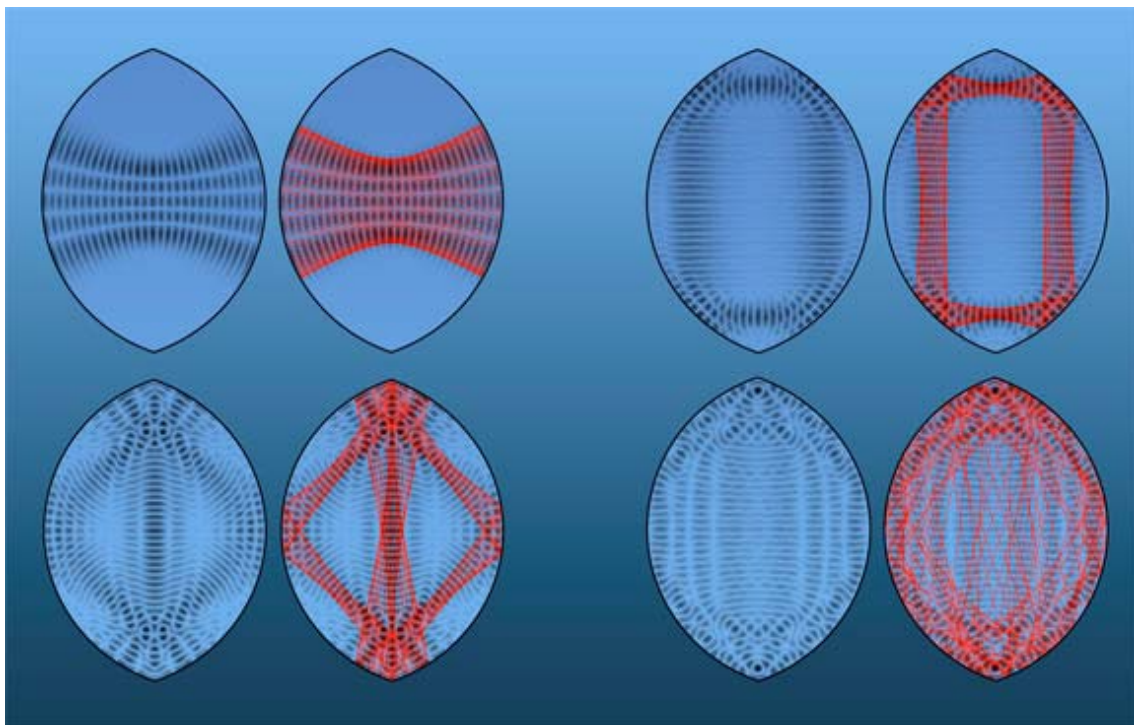


Figura 1. Funciones de onda para cuatro estados de distinta energía de un billar cuántico con forma de limón. Se muestra en negro la densidad de probabilidad cuántica y en rojo (a la derecha) la traza de una trayectoria clásica. Se pone de manifiesto la correspondencia entre las trayectorias clásicas y las funciones de onda cuánticas.

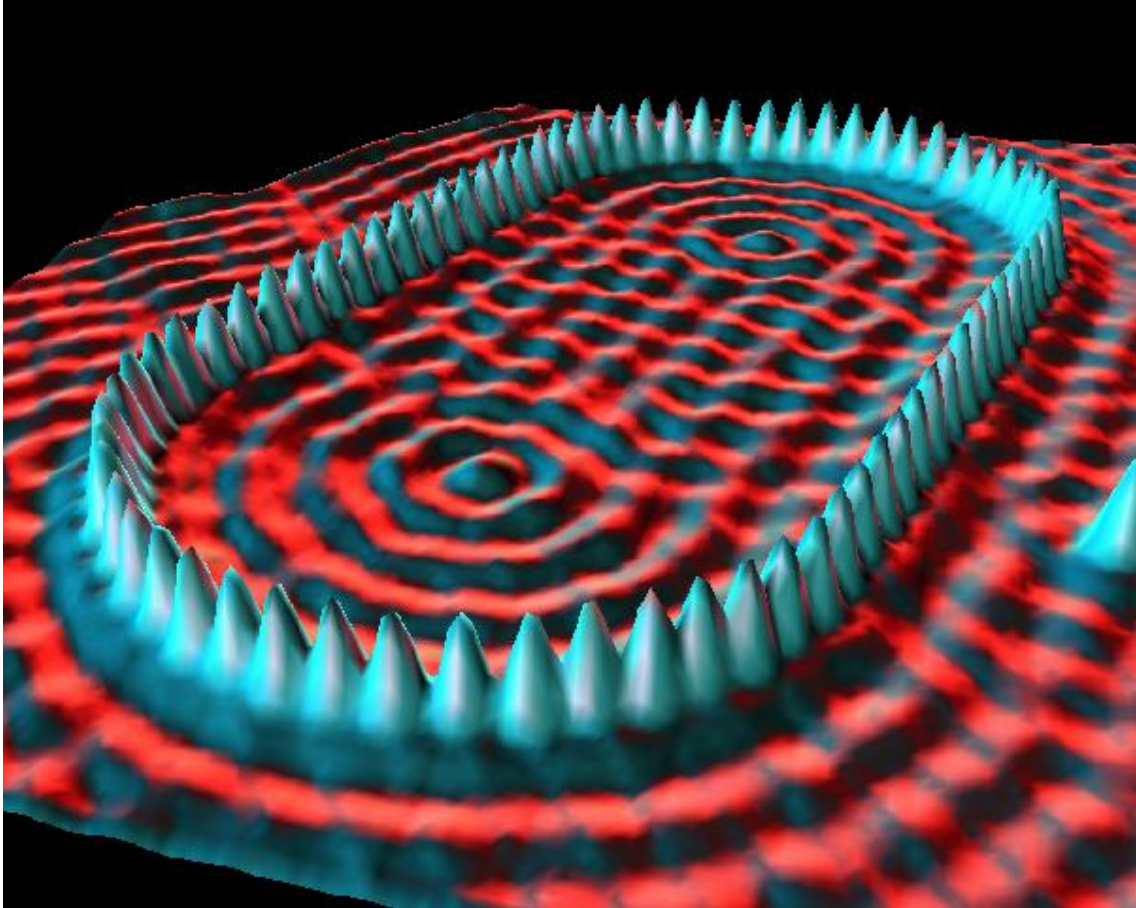


Figura 2. Corral cuántico con la forma del billar del estadio formado por átomos de hierro sobre una superficie de cobre. El experimento fue realizado mediante un microscopio de efecto túnel en los laboratorios de IBM en Almaden (1993).

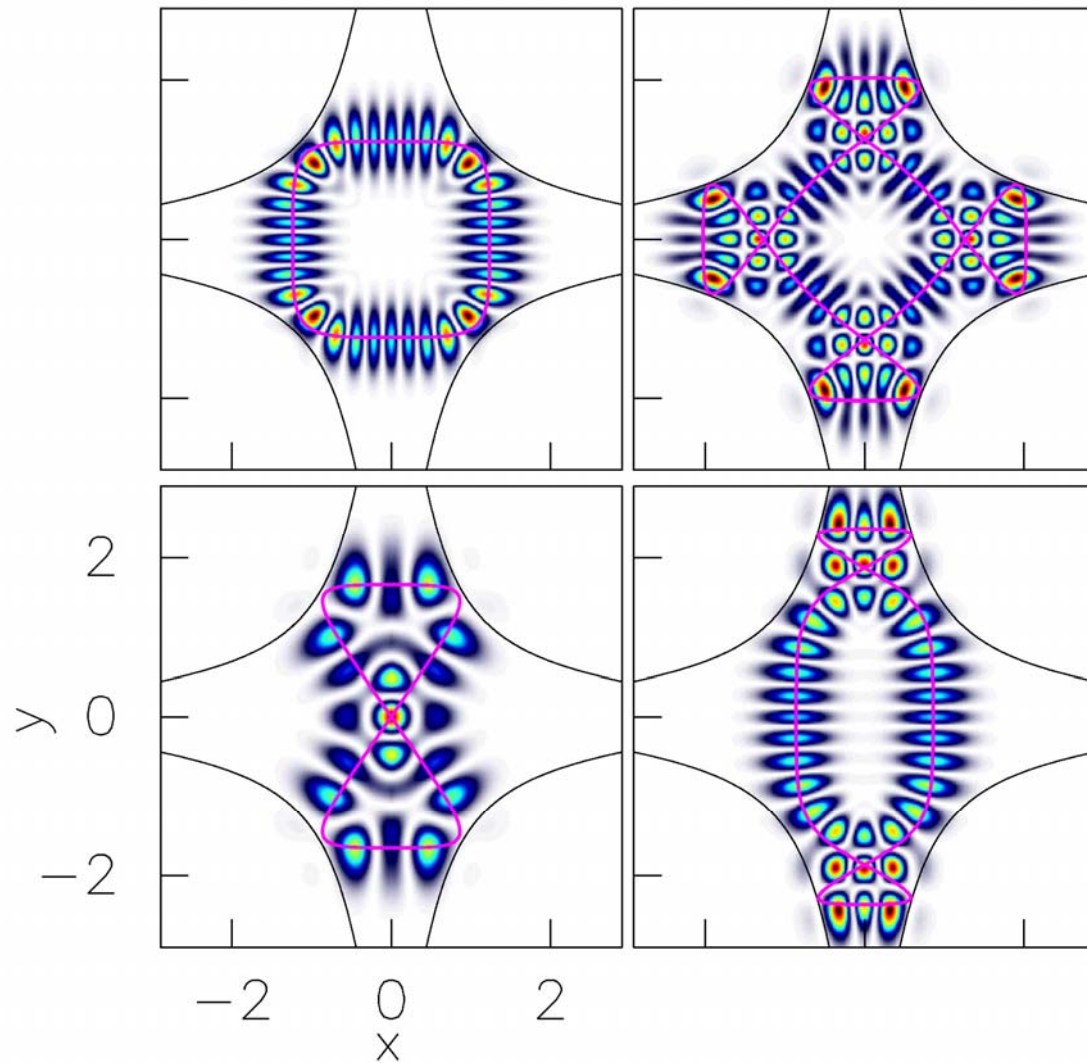


Figura 3. Funciones de onda para cuatro estados de *scar* con distinta energía de un oscilador anarmónico bidimensional. Este sistema es clásicamente caótico. Se muestran en color las densidades de probabilidad (de azul, menor a rojo, mayor) y se observa que la función de onda se localiza sobre ciertas órbitas periódicas clásicas, dibujadas en rojo.