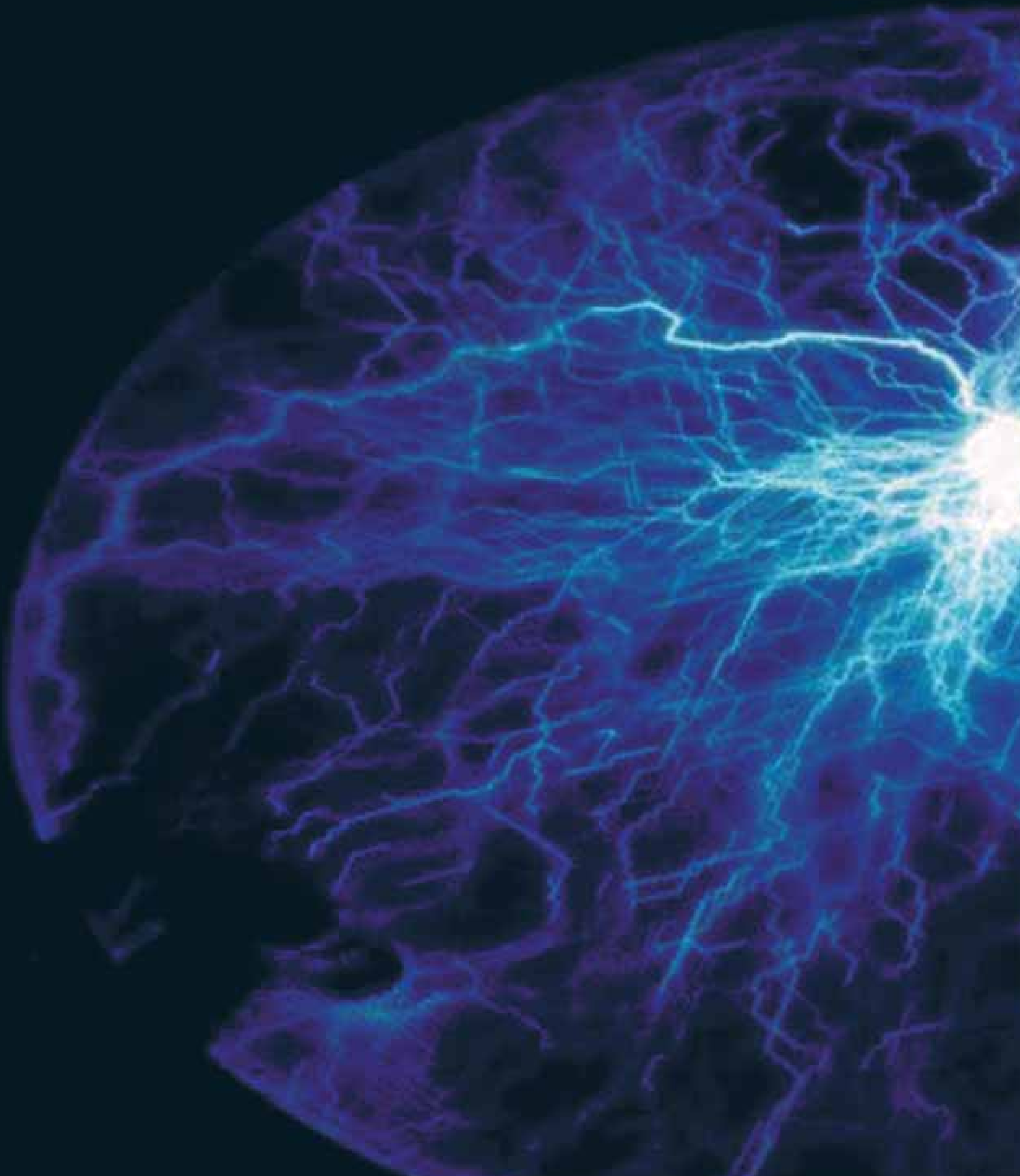
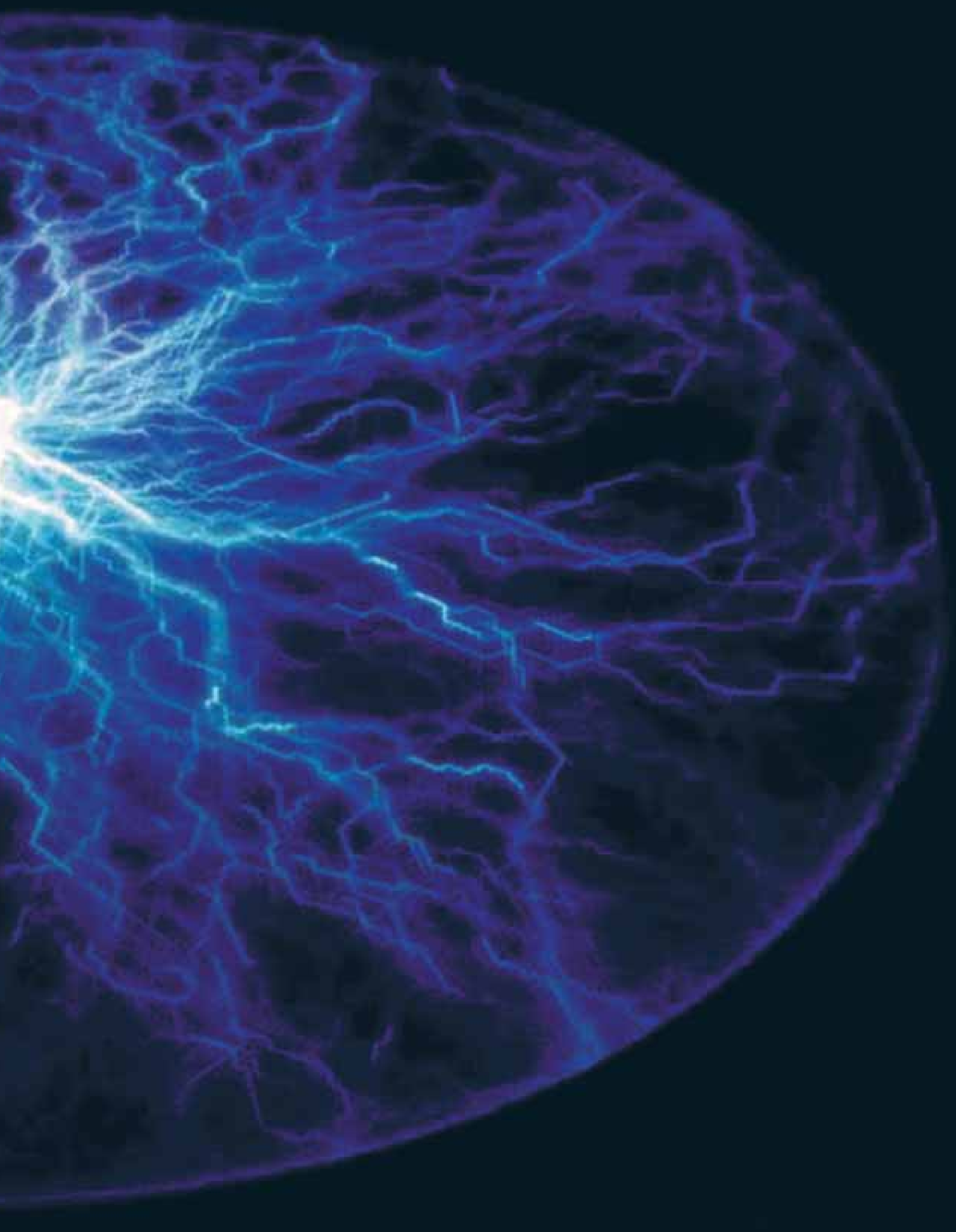


Mecánica estadística, topología y el sonido del tambor

Aldemar Torres / Gabriel Téllez



Plasma, un sistema de Coulomb.
http://www.mit.edu/~johanna/europe/edinburgh/plasma.jpg

> Mecánica estadística, topología y el sonido del tambor

Aldemar Torres / Gabriel Téllez

Los fenómenos químicos, presentes en todas nuestras actividades cotidianas y gracias a los cuales es posible la existencia tal como la conocemos, consisten en la reorganización de las partes constituyentes de la materia: las moléculas y los átomos. Estos a su vez están compuestos de partículas cargadas eléctricamente. Generalmente estos constituyentes microscópicos son eléctricamente neutros. Sin embargo, es posible que fenómenos físicos o químicos produzcan partículas con carga neta diferente de cero. El escenario de tales sistemas a nivel microscópico es el de muchas partículas interactuando mediante la fuerza electrostática de Coulomb. En este artículo discutimos algunas propiedades de estos importantes sistemas, en particular propiedades que dependen de su forma, o más precisamente de su topología, lo cual nos permitirá encontrar una relación interesante entre estos sistemas, tan comunes en nuestras vidas, con conceptos matemáticos que podrían parecer lejanos a nuestra realidad.

> Un poco de topología

Desde nuestra niñez hemos estado familiarizados con las formas del mundo que nos rodea. Es así como aprendemos que un triángulo es diferente a un círculo y estos a su vez son diferentes de un cuadrado. Probablemente, de observaciones tan "obvias" como estas surgió lo que conocemos como la geometría euclidiana. Sin embargo, no toda la matemática está sustentada en observaciones como esas. Por ejemplo, para la topología, el número de lados o ángulos de un triángulo no son relevantes, lo que importa son aquellas propiedades de la figura que permanecen inalteradas bajo deformaciones. Es así como en el sentido topológico, un triángulo, un círculo y un cuadrado son equivalentes.

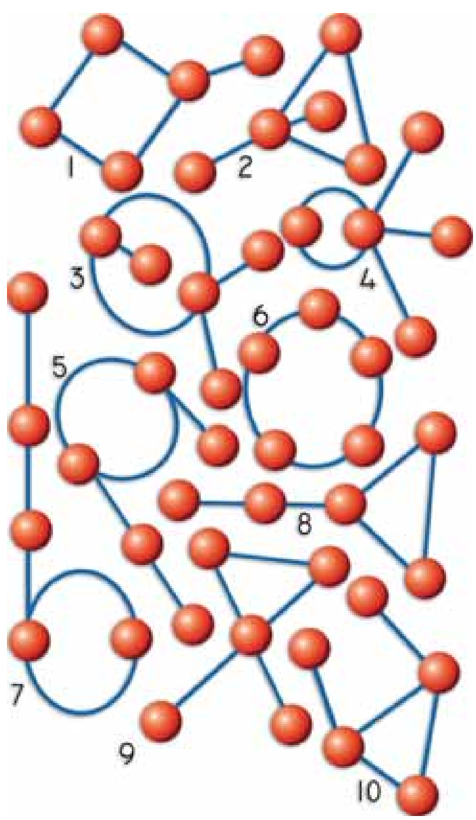


Figura 1.
Equivalencia topológica

Por esta razón, John L. Kelley, un conocido matemático del siglo XX, solía referirse a los topólogos como matemáticos que no conocen la diferencia entre una *donut* o rosquilla y una taza de café [1]. Afortunadamente esta diferencia es obvia en lo concerniente a la vida práctica –¡a nadie le gustaría masticar su tasa de café mientras agita el azúcar de su rosquilla caliente!–, sin embargo, el concepto de identidad topológica no está tan lejos de nuestra realidad física como podría pensarse. En este artículo veremos un ejemplo de cómo la igualdad de dos sistemas, en el sentido topológico, hace que ellos posean características similares en una propiedad física: su energía, que es susceptible de ser medida. Pero antes, permítanos el lector plantearle un pequeño acertijo topológico:

Considere las estructuras de la figura 1, hechas de esferas conectadas por bandas elásticas. ¿Cuáles de ellas son topológicamente equivalentes? Encuentre las respuestas al final del artículo.

Un invariante topológico, es una cantidad que se mantiene invariante bajo transformaciones topológicas, es decir, bajo deformaciones "elásticas" que mantienen la proximidad entre puntos vecinos [2]. Transformaciones como estas nos permiten convertir una en otra las estructuras topológicamente equivalentes de la figura 1, y la forma de la tasa llena de café de nuestro ejemplo anterior en una *donut*. En dos dimensiones, el invariante topológico más importante se conoce como el número de Euler y se denota por la letra griega χ (chi). Así, dos figuras topológicamente equivalentes comparten el mismo número de Euler. La definición de este número es muy sencilla [1,5]:

χ=2-(2 x número de asas o agarraderas)-(número de bordes).

Por ejemplo, una esfera no tiene bordes y tampoco asas. Por otro

1

2

3

4

5

Figura 2.
Objetos con asas y bordes, para calcular su número de Euler

lado, la *donut* de nuestro ejemplo no tiene bordes pero tiene una agarradera y su número de Euler es cero, el mismo que el de una taza llena de café, la cual también tiene una agarradera. Como ejercicio, ¿podría el lector encontrar el número de Euler de los siguientes objetos de la figura 2? Encuentre las respuestas al final del artículo.

> Un poco de mecánica estadística

Ya sea por razones culinarias o científicas, todos algunas vez en la vida hemos realizado la simple tarea de disolver sal en agua. Pero ¿en qué consiste el proceso de disolución? Consideremos un cristal de sal, recordemos que este sólido está formado por átomos de sodio y átomos de cloro. Recordemos también que el agua es un compuesto polar, es decir que sus moléculas tienen un extremo positivo y otro negativo. Cuando un cristal de cloruro de sodio es introducido en el agua, se produce una interacción entre las moléculas de agua y los átomos del sólido, de forma tal que estos últimos tienden a separarse. Los átomos de cloro quedan con una carga neta negativa que atrae la parte positiva de las moléculas de agua. Similarmente los átomos de sodio, que quedan con un exceso de carga positiva, atraen la parte negativa de las moléculas de agua, produciéndose así una solución de iones como se muestra en la figura 3.

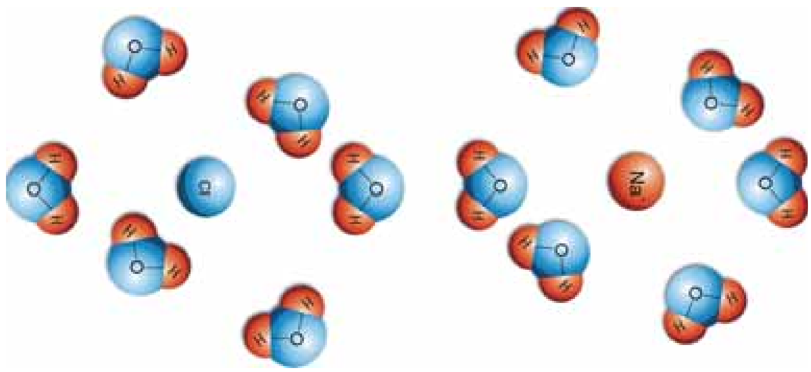


Figura 3.
Solvatación de NaCl

Se dice entonces que los iones han quedado solvatados, es decir rodeados por las moléculas del solvente. En el caso particular del agua, se dice que los iones han quedado hidratados. Tal solución de iones es un ejemplo de lo que en química se conoce como electrolito [3]. A causa de la diferencia en la carga eléctrica, los iones interactúan entre sí mediante la fuerza de Coulomb. Los electrolitos y otros sistemas físicos formados por muchas partículas que interactúan mediante una fuerza de este tipo se conocen genéricamente como sistemas de Coulomb. En esta denominación se incluyen además los plasmas. Estos son gases tan calientes que a causa de la agitación térmica sus moléculas se rompen produciéndose iones con diferente carga eléctrica.

Veamos ahora cómo nuestra simple solución de sal en agua es en realidad un sistema físico asombrosamente complicado. Supongamos que disolvemos una cucharada de sal común, aproximadamente 20 gramos. Como el peso molecular de la sal es 58.44 g/mol, en tal cantidad de agua

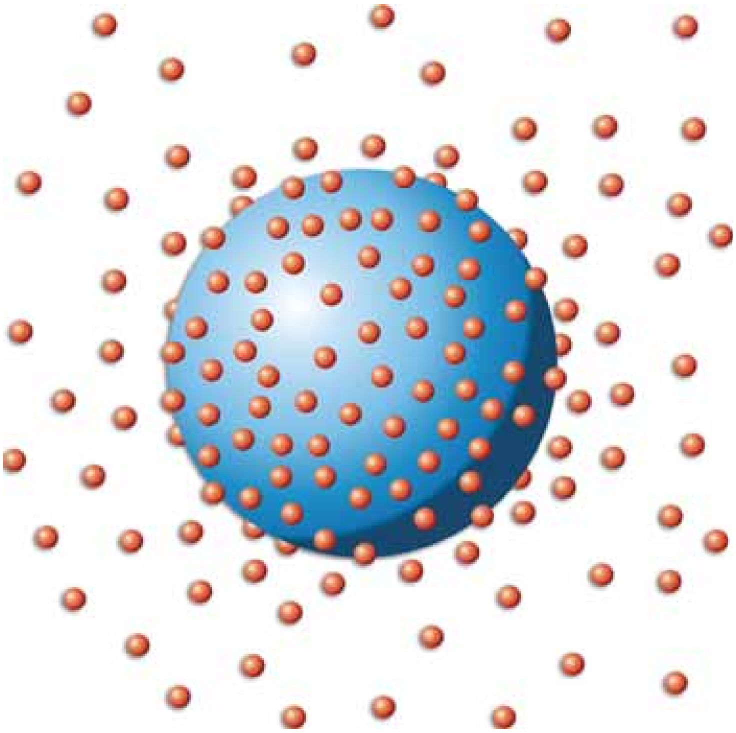


Figura 4.
Esfera de Debye

debe haber aproximadamente $\frac{1}{3}(6\times10^{23})$ moléculas, que al hidratarse producen el mismo número de iones de sodio y otros tantos de cloro. Suponga ahora el lector que se dedicara toda su vida a contar y trabajara a toda velocidad, desde la edad que aprendió a contar hasta la edad de su retiro, sesenta y cinco años. Sería considerado una estrella si alcanza a la cifra de 2 x 10^9. Ahora, suponga que toda la humanidad, aproximadamente 7 x 10^9 personas se dedican a contar. Para alcanzar a contar uno por uno los iones de nuestra solución, en el régimen laboral tendría que cambiarse la edad de jubilación a 6'500.000 años, lo cual seguramente disgustaría a muchos sindicatos. Pero eso no es todo, recuerde el lector que cada ion interactúa con todos los demás iones de la solución mediante la fuerza de Coulomb. Así que si quisiéramos encontrar las ecuaciones que gobiernan el movimiento del sistema tendríamos que sumar

$$\frac{1}{2}\times\left(\frac{1}{3}\times6\times10^{23}\right)\times\left(\frac{1}{3}\times6\times10^{23}\right)=2\times10^{46}$$

fuerzas. Aquí hemos multiplicado por un factor $\frac{1}{2}$ para no contar dos veces la misma fuerza.

Obviamente ante semejante cifra tan monstruosa las leyes de la mecánica newtoniana o el poder de las computadoras son inútiles. Este tipo de problemas dieron origen a lo que se conoce como mecánica estadística. En esencia, la mecánica estadística nos permite hacer indirectamente tales sumas. En el mundo macroscópico la suma de ese gran número de fuerzas se manifiesta como la presión y tensión superficial del sistema. Cantidades como estas se conocen como propiedades termodinámicas y son la resultante a nivel macroscópico de las complicadas interacciones que ocurren a nivel microscópico en la materia.

Aunque la mecánica estadística es una herramienta poderosa, para poder encontrar las propiedades termodinámicas de nuestra solución de sal en agua, es necesario introducir simplificaciones al problema. Es posible demostrar que si la concentración de los iones es suficientemente baja, de forma tal que la energía de agitación térmica de los iones sea mayor que la energía de interacción electrostática, los iones ya no interactúan todos entre sí sino únicamente con sus vecinos más cercanos. Tal régimen se conoce como el régimen de Debye-Hückel. En este, cada partícula del sistema crea alrededor de sí una nube de iones de carga opuesta que apantallan la interacción de Coulomb limitándola a los iones de la nube. Así, un ion que se encuentre fuera de ésta prácticamente no sentirá la presencia del ion apantallado.

Esta nube de apantallamiento es en realidad muy difusa a causa de la agitación térmica de los iones. Su tamaño promedio se conoce como longitud de Debye y se simboliza l_D. Esta es una cantidad muy importante en la mecánica estadística de los fluidos iónicos y puede variar considerablemente dependiendo de la temperatura, la concentración y la carga de los iones [4]. Como todos estos parámetros son fáciles de controlar en el laboratorio, la longitud de Debye es también una cantidad muy importante en física experimental. Como veremos a continuación, los sistemas con distintas longitudes de Debye muestran marcadas diferencias en sus propiedades.

> Nuestros resultados

¿Qué tiene que ver el invariante topológico χ con nuestra solución de sal o más generalmente con los sistemas de Coulomb? Para responder esta pregunta empezaremos considerando uno de tales sistemas en forma de disco. La frontera del sistema está rodeada de un material conductor, un metal por ejemplo, que se mantiene conectado a tierra para que el potencial eléctrico en la frontera del disco sea constante e igual a cero. Recientemente los autores desarrollaron un método para calcular las cantidades termodinámicas para este sistema [5]. Estas se pueden escribir convenientemente en una sola expresión, la cual se conoce en termodinámica como el gran potencial y se denota por la letra griega Ω (omega). El gran potencial representa la máxima energía que se puede sacar, como trabajo, de un sistema termodinámico. Para aclarar este concepto, consideremos el siguiente ejemplo:

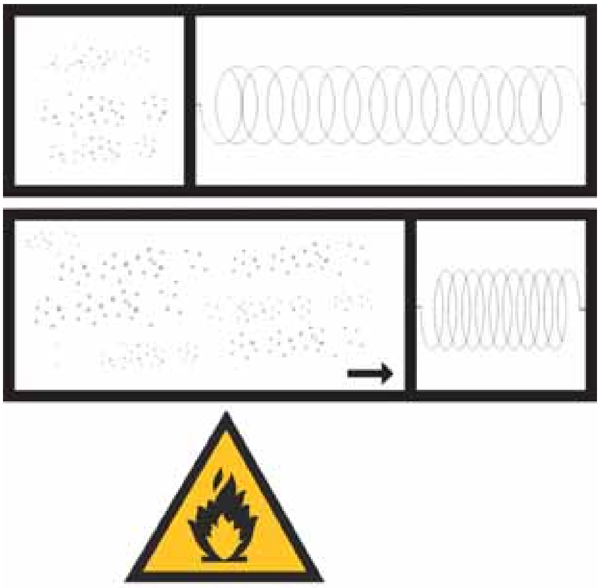


Figura 5.
Pared adiabática permeable dentro de un émbolo

En la figura 5 vemos un sistema confinado a un cierto volumen. Una de las paredes es un émbolo que puede moverse libremente dependiendo de las condiciones del sistema y del ambiente que lo rodea. Supongamos que esta pared móvil está hecha de un material que permite el paso de partículas. La pared puede moverse hacia la derecha a causa de dos mecanismos. Cuando el sistema se calienta se expande y mueve la pared. Por otro lado, partículas del exterior pueden entrar al sistema aumentando la presión en el interior, la cual mueve la pared. En ambos casos se produce una fuerza neta sobre la pared móvil, la cual al moverse entrega trabajo al ambiente al comprimirse el resorte. La máxima cantidad de trabajo que puede sacarse del sistema es la diferencia del gran potencial entre los estados inicial y final.

En el caso del sistema de Coulomb en el disco, nuestros cálculos arrojaron el siguiente resultado:

$$\frac{\Omega_{disco}}{k_B T} = \frac{1}{4\pi^2 l_D^2}\left[\ln 2l_D - \gamma + \frac{1}{2}\right]\pi R^2 - \frac{1}{8l_D}2\pi R + \frac{1}{6}\ln R$$

La constante k_B se conoce como constante de Boltzmann y T es la temperatura del sistema. Así, $k_B T$ es la energía cinética promedio de uno de los iones. Esta cantidad se introduce en la fórmula para que el gran potencial quede expresado en estas unidades naturales de energía. En el primer término, del lado derecho aparece el factor πR^2, que es justamente el área de un disco de radio R. Así que el coeficiente que acompaña a este factor nos da la presión del sistema. El símbolo γ se conoce como la constante de Euler –no confundirla con la característica de Euler χ– que tiene el valor aproximado de 0.57721. La parte entre corchetes cuadrados es prácticamente constante ya que la función logaritmo varía muy lentamente al cambiar su argumento, pero el término

$$\frac{1}{4\pi^2 l_D^2}$$

sí puede variar considerablemente al cambiar la longitud de Debye. Vemos entonces que la presión del sistema depende fuertemente de los parámetros de los que depende l_D, es decir de la concentración, la temperatura y la carga de los iones. El coeficiente que acompaña a $2\pi R$, el perímetro del disco, nos da la tensión superficial. Ésta también depende intensamente de la longitud de Debye; así, un sistema con l_D pequeña mostrará una gran tensión superficial.

El tercer término, sin embargo, es de una naturaleza muy diferente. Este término es independiente de las propiedades microscópicas del sistema, ya que no depende de l_D. Es decir, no importa si cambiamos el tipo de iones que estamos considerando o su concentración, este término en el gran potencial siempre será el mismo. En este sentido decimos que este es un término universal en el gran potencial.

Veamos ahora qué pasa si cambiamos la forma de nuestro sistema. Supongamos que en lugar de ser un disco, el sistema tiene forma de anillo, con frontera interior de radio R_1 y frontera exterior de radio R_2, ambas conectadas a tierra. En este caso nuestros cálculos del gran potencial arrojaron el resultado:

$$\frac{\Omega_{anillo}}{k_B T} = \frac{1}{4\pi^2 l_D^2}\left[-\ln\frac{L}{2l_D} - \gamma + \frac{1}{2}\right]\pi\left(R_2^2 - R_1^2\right) - \frac{1}{8l_D}2\pi\left(R_1 + R_2\right)$$

La presión del sistema, el coeficiente que acompaña el área del anillo $\pi\left(R_2^2 - R_1^2\right)$ en el primer término, resulta ser igual al caso del disco. La tensión superficial, el término que acompaña al perímetro total del anillo, $2\pi(R_1 + R_2)$, es también igual. Nuevamente ambas cantidades dependen de las propiedades microscópicas del sistema, es decir de l_D. Notamos sin embargo que en este caso el tercer término, el término universal, no aparece.

Es hora de usar nuestros conocimientos de topología. Recordemos que el número de Euler, χ, para un disco es uno y para un anillo es cero. ¿Será posible entonces que el coeficiente de nuestro término universal tenga algo que ver con el número de Euler del sistema? Ciertamente un par de ejemplos no son suficientes para afirmar tal cosa, pero la investigación de los autores demuestra que es así.

Para lograr probar esto fue necesario encontrar el gran potencial para un sistema de forma arbitraria. En este caso general, encontramos que el término universal es igual a:

$$\frac{\chi}{6}\ln R\ .$$

Así, en el caso de un disco $\chi = 1$, este toma el valor:

$$\frac{1}{6}\ln R$$

y en el caso de un anillo este término se anula lo cual concuerda con nuestros resultados previos.

Figura 6.
Membrana de un tambor en vibración (simulación exagerada). La curvatura «interior» de la membrana se refiere a la que resulta de la ondulación de la vibración

> Escuchando la forma de un tambor: algunos detalles sobre nuestro método

Como mencionamos en la sección anterior, para encontrar la expresión general del término universal en el gran potencial, necesitamos resolver el problema para cualquier geometría. La solución a este problema está muy relacionada con un problema de matemáticas famoso, que fue planteado y parcialmente resuelto por Mark Kac en los años sesenta. Un colega suyo, el profesor Berg, sugirió plantear el problema en los siguientes términos: "¿si usted conociera las frecuencias del sonido de un tambor, podría averiguar la forma de su membrana?", o en palabras de Kac: "¿puede uno escuchar la forma de un tambor?" [6].

Este problema todavía no está resuelto en su aspecto general pero, cuando la membrana del tambor tiene la forma de lo que los matemáticos llaman "variedad Riemanniana", se ha podido demostrar que es imposible determinar la forma exacta de la membrana del tambor conociendo sus frecuencias. Sin embargo, Kac y posteriormente McKean y Singer [7] lograron demostrar que es posible determinar su área superficial y sus curvaturas. Por curvaturas nos referimos no sólo a la curvatura del borde de la membrana sino también a la curvatura "interior", como se ilustra en la figura 6.

¿Qué tiene que ver todo esto con el número de Euler y con nuestro problema de calcular el gran potencial para un sistema de Coulomb? La relación con el número de Euler viene en la forma de otro famoso teorema, el teorema de Gauss-Bonnet [8]. Este resultado relaciona ciertas integrales, en términos de las curvaturas de una superficie, con el número de Euler. En el lenguaje de Kac, este importante resultado de geometría diferencial nos dice que es posible oír el número de Euler de la membrana de un tambor.

La relación de este problema geométrico con los sistemas de Coulomb tiene que ver con las frecuencias. Matemáticamente, estas frecuencias son una sucesión de números cada uno de los cuales tiene asociada una función llamada "función propia". Estas funciones se pueden utilizar como un molde para expresar otras en términos de una suma infinita de ellas. En nuestro trabajo utilizamos este hecho para expresar el potencial de Coulomb en términos de tales funciones propias. Luego, mediante una transformación utilizada en el estudio de la teoría de campos cuánticos, conocida como "transformación de Sine-Gordon", logramos expresar el gran potencial como un producto infinito en términos de las frecuencias del sistema de Coulomb, entendido como la membrana de un tambor. Como se explicó anteriormente, la información sobre la geometría de la membrana está contenida en estas frecuencias. En nuestro caso esta geometría corresponde a la forma del sistema de Coulomb, por ejemplo el anillo o el disco en nuestros ejemplos anteriores. Así, utilizando algunas funciones especiales y un procedimiento matemático conocido como “la regularización zeta”, para encontrar nuestro producto infinito, logramos conectar el gran potencial con los resultados de Kac, McKean y Singer. El lector interesado en los detalles de este cálculo puede consultar la tesis de maestría de Aldemar Torres, la cual se encuentra disponible en la Biblioteca de la Universidad de los Andes [9].

> Resumen y conclusión

Hemos visto cómo una taza del café una rosquilla y un puñado de sal disuelta en agua tienen más en común que ser ingredientes del desayuno de muchos de nosotros. Los físicos teóricos frecuentemente utilizan ideas matemáticas muy abstractas para generalizar sus teorías, hacerlas compatibles con otras y aplicables al mayor número posible de sistemas, por distintos que parezcan al escrutinio de nuestros sentidos. Detrás de esas poderosas estructuras del pensamiento está la realidad física del mundo material, de las cosas que podemos medir y observar con nuestros sentidos o con extensiones de los mismos. De esta manera, los resultados de la física teórica a veces invaden el territorio de las matemáticas, y la frontera entre estas ciencias se torna tan difusa como las nubes de apantallamiento de Debye. En este artículo hemos querido presentar un pequeño ejemplo de este tipo de razonamiento.

> Solución a los acertijos

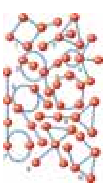


Figura 1
Sólo las figuras 2 y la 9 son topológicamente equivalentes.

Figura 2
1) Balón, 0 asas, 0 bordes: $\chi = 2$
2) *Donut*, 1 asa, cero bordes: $\chi = 0$
3) CD, 0 asas, 2 bordes: $\chi = 0$
4) Azucarera, 2 asas, 0 bordes: $\chi = -2$
5) Carpeta de argollas, 3 asas, 1 borde: $\chi = -5$

> Referencias

[1] Moscovich, I. *1000 Play Thinks*. Workman, 2001.

[2] Alexandrov, P. *Elementary concepts of topology*. Dover, 1961.

[3] Davidson, S. V. W. *College Chemistry*. 3rd Edition. McMillan, 1969.

[4] McQuarrie D. A. *Statistical Mechanics*. 2nd Edition. University Science Books, 2000.

[5] Torres, A. and Téllez, G. “Finite-Size Corrections for Coulomb Systems at the Debye-Hückel Regime”. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. **37** 2121-2137 (2004).

[6] Kac, M. “Can one hear the shape of a drum?” *American Mathematical Monthly* **73** 1 (1966).

[7] McKean H. P. and Singer, I. M. “Curvature and the eigenvalues of the Laplacian”. *Journal of Differential Geometry*. **1** 43 (1967).

[8] Lipschutz, M.M. *Theory and Problems of Differential Geometry*. McGraw-Hill, 1969.

[9] Torres, A. “Sine-Gordon Field Theory for the Calculation of Universal Finite Size Corrections in the Free Energy of Coulomb Systems at the Debye-Hückel Regime”. Tesis de Magister en Física, Universidad de los Andes, 2004.

> Reseña de los autores

Aldemar Torres
Físico de la Universidad Nacional y Magíster en Ciencias-Físicas de la Universidad de los Andes. Su tesis de Magíster sobre Sistemas de Coulomb fue laureada en abril de 2004. Actualmente adelanta estudios de doctorado en el Instituto de Física Teórica de la Universidad de Utrecht en los Países Bajos.

Gabriel Téllez
Doctor en Física Teórica de la Universidad de París XI, Francia. Profesor asociado del Departamento de Física de la Universidad de los Andes. Su área de especialización es la mecánica estadística de sistemas de partículas cargadas.