

Transiciones de fase

Gerardo García Naumis

“Pues ¿qué os pudiera contar, Señora, de los secretos naturales que he descubierto estando guisando? Veo que un huevo se une y fríe en la manteca o aceite y, por contrario, se despedaza en el almíbar; ver que para que el azúcar se conserve fluida basta echarle una muy mínima parte de agua en que haya estado membrillo u otra fruta agria; ver que la yema y clara de un mismo huevo son tan contrarias, que en los unos, que sirven para el azúcar, sirve cada una de por sí y juntos no. Por no cansaros con tales frialdades, que sólo refiero por daros entera noticia de mi natural y creo que os causará risa; pero, señora, ¿qué podemos saber las mujeres sino filosofías de cocina? Bien dijo Lupercio Leonardo, que bien se puede filosofar y aderezar la cena. Y yo suelo decir viendo estas cosillas: Si Aristóteles hubiera guisado, mucho más hubiera escrito.”

Sor Juana Inés de la Cruz, en “Respuesta de la poetisa a la muy ilustre Sor Filotea de la Cruz “.

En este genial párrafo de Sor Juana Inés de la Cruz pueden diferenciarse varios niveles de lectura. Uno es el biográfico; nos describe sus inclinaciones científicas y con ello nos refrenda el derecho de las mujeres a pensar sobre los misterios del universo. En otro nivel se refiere, por cierto no sin cierta sorna, a los métodos dogmáticos reinantes en su época así como a la importancia de realizar experimentos para entender la naturaleza. Desde luego en este capítulo lo mas interesante para nosotros son sus observaciones sobre lo que sucede al realizar ciertas mezclas. Nos indica por ejemplo como mantener fluída el azúcar. Pero al observar que el azúcar puede ser fluída o sólida, Sor Juana nos lleva a la idea de fase y a la posibilidad de pasar de una a otra, el cual es justamente el tema de este capítulo. Mas aún; en otro nivel de lectura Sor Juana nos habla sobre dos temas cuyo verdadero impacto en la física y química se ha dejado empezar a sentir sólo en los últimos 50 años: los fluidos complejos y la materia blanda. En este capítulo hablaremos de cómo aborda la física las transiciones de fase y veremos como a fines del siglo XX se descubren nuevos tipos de fases como las cuánticas topológicas.

Comencemos notando que para el caso del azúcar hay un cambio claro en una propiedad física del sistema, su fluidez, la cual está dictada por la rigidez mecánica del material. Un ejemplo muy familiar tomado también de la cocina es el del agua. A la presión atmosférica se vuelve vapor a los 100°C. El agua se volverá sólida a los 0°C. Al variar la presión, las temperaturas de ebullición y congelamiento varían. Toda esta información puede recogerse en un diagrama (ver Fig. 1), donde se indican las fases que toma el sistema en función de las condiciones externas impuestas a éste, en este caso, la presión y temperatura. Durante estos cambios de fase aparecen discontinuidades de algunas magnitudes termodinámicas, como en la densidad o los calores específicos. Además pueden existir puntos donde coexistan las fases o donde se termine una curva que separe las fases. El punto triple del agua es un ejemplo de lo primero. Allí conviven el agua con el hielo y vapor. La vida en la Tierra es posible por ser las condiciones de presión y temperatura cercanas a este punto. De la Fig. 1 vemos también que existe un punto llamado crítico donde deja de distinguirse el gas del agua.

Si pensamos en otras propiedades físicas de las sustancias como podrían ser su naturaleza magnética (ferromagnética, antiferromagnética, paramagnética, diamagnética) , de conducción electrónica (dieléctrico, metal, semiconductor, superconductor), ordenamiento atómico, etc., los diagramas de fase pueden ser mucho mas complejos. La historia se complica aún mas cuando empezamos a jugar como Sor Juana mezclando sustancias. Las concentraciones de cada componente de la mezcla constituyen

nuevas variables con las cuales se obtienen nuevas fases. Pongamos otra vez un ejemplo proveniente de las cocinas virreinales. Los arrieros neveros, tal y como lo describe Alejandro de Humboldt, en su “*Ensayo Político sobre el Reino de la Nueva España*” bajaban hielo y nieve de los glaciares volcánicos para elaborar nieves y helados de diversos sabores. Para hacerlos se vertía jugo de frutas con agua o leche en una cubeta, poniendo esta a su vez dentro de otra cubeta externa de diámetro mayor. El espacio entre ambas cubetas se rellenaba con una mezcla de hielo y sal. Luego se giraba unas pocas veces la cubeta interna, resultando en que el jugo de frutas con agua o leche se congelaba casi instantáneamente, produciéndose así la nieve o helado. La razón de esto es simple; si observamos el diagrama de fases de la Fig. 2, la sal disminuye la temperatura de fusión del hielo. Así, la mezcla de hielo y sal se vuelve inestable a 0° por lo cual absorbe calor de la leche o el agua para “intentar” derretirse. El calor que libera la leche o agua con jugo provoca que éstos se congelen dando lugar a la deliciosa nieve o helado.

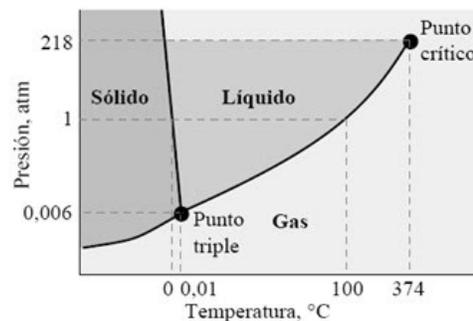


Fig. 1. Regiones que indican las fases del H₂O dadas las condiciones externas de presión y temperatura. Las líneas representan condiciones donde ocurren los cambios de fase. En esas condiciones se observa la coexistencia de dos o más fases. Nótese que existe un punto llamado triple donde coexisten el hielo, agua y gas. Además hay un punto llamado crítico donde se termina la línea de ebullición del agua. Arriba de él no hay distinción entre gas y líquido; se le conoce como fluido supercrítico. No se sabe si existe un punto similar para la transición sólido-líquido. El diagrama está simplificado; el hielo presenta 18 fases con diferentes simetrías.

Los diagramas de fase a los que se refiere Sor Juana consisten en mezclas de sustancias que tienen diferentes interacciones entre ellas. Un ejemplo es el agua y el aceite. Normalmente se separan sin mezclarse; pero puede ser que mediante algún tercera sustancia, como el jabón, se puedan mezclar. El secreto es que las moléculas de la tercera sustancia tengan diferentes terminaciones. Un tipo de terminación atrae a la primera sustancia y la otra terminación atrae a la segunda sustancia. En el caso del jabón, las moléculas tienen una terminación soluble en grasas (liposoluble) y otra soluble en agua (hidrosoluble). La mayonesa es una emulsión donde se logra este efecto. Los diagramas de fase resultantes son muy complicados y se les conoce como fluidos complejos. Además, si seguimos los pasos de Sor Juana en la cocina y nos fijamos en otras cosas como la cerveza, el café capuchino o las gelatinas, podremos observar tipos exóticos de fases como las espumas o los geles. Estas no son ni líquidas, ni sólidas ni gaseosas, sino que son fases enteramente diferentes. Este es el campo de estudio de la llamada materia blanda. No debe despreciarse su importancia. La caída del transbordador espacial “Columbia” se debió en gran medida, según el reporte de la NASA, al pobre entendimiento de las espumas. Las vibraciones mecánicas provocaron un desprendimiento de la espuma aislante del tanque de combustible. La espuma impactó las alas del transbordador y rompió los aislantes térmicos de protección. La rotura de los aislantes del ala eventualmente llevaría a la desintegración de la nave a su reingreso a la Tierra.

Para entender toda la fenomenología descrita debemos desmenuzar el concepto de fase de la materia. Microscópicamente la materia está formada por muchas entidades, tales como átomos o moléculas, las cuales interactúan entre sí mediante fuerzas. Aunado a esto, existen restricciones impuestas desde el exterior del sistema, como pueden ser la presión o temperatura. Resultado de todas estas interacciones y restricciones aparecen *comportamientos colectivos*, conocidos también como *fenómenos emergentes*. En este sentido, la materia constituye lo que se le llama un *sistema complejo*. Un fase corresponde entonces a la existencia de uno o mas comportamientos colectivos específicos, los cuales generalmente pueden ocurrir para varias combinaciones de los parámetros externos. Retomando el caso del agua, en general las fases fluidas tienen la propiedad colectiva de no resistir esfuerzos cortantes, es decir, el módulo de corte es cero a diferencia de los sólidos.

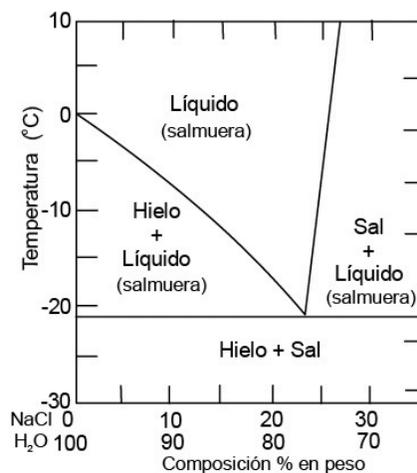


Fig. 2. Diagrama de fases para sal disuelta con agua en función de la temperatura y la proporción en peso de sal diluída. La presión es de 1 atmósfera. Nótese que hay regiones donde coexiste el hielo y la salmuera (agua con sal), pero hay una proporción de sal donde el sistema se comporta como una sustancia pura, dado que no se segrega el hielo con salmuera . Esto sucede para un 23% de sal en masa y una temperatura de fusión de -21 °C. Se le conoce como punto eutéctico y es la mínima temperatura donde puede tenerse líquida a la salmuera. Diagramas análogos se obtienen para aleaciones metálicas, vidrios, fluidos complejos, etc. Muchos vidrios y aleaciones tienen una composición óptima en sus propiedades físicas en la concentración correspondiente al punto eutéctico.

De lo anterior se sigue que hay dos aspectos importantes al tratar las fases y las transiciones entre ellas, uno consiste en trabajar con las variables macroscópicas y su termodinámica, la otra en utilizar un enfoque microscópico basado en la estadística para entender de donde surgen las variables macroscópicas y las relaciones entre ellas (ecuaciones de estado). Podemos ver aquí como la física estadística es un muy exitoso proceso de renormalización de grados de libertad, es decir, empezando con aproximadamente 10^{23} grados, éstos se logran reducir a unas pocas combinaciones de ellos, como lo son sacar promedios o desviaciones cuadráticas. Finalmente, el sistema se acaba describiendo por su energía cinética promedio , energía total promedio, etc., que al comparar con la termodinámica se identifican con las variables macroscópicas tales como temperatura, energía interna, etc.

En las transiciones de fase el contacto entre la física estadística y la termodinámica no es tan terso como pudiera pensarse y existen desde luego muchas preguntas abiertas. Un ejemplo típico lo constituyen los vidrios, los cuales son materiales sólidos con una estructura no-periódica. Para formarlos se requiere enfriar rápidamente a un líquido de modo tal que las condiciones externas de presión y temperatura donde normalmente empezaría a cristalizar con un enfriamiento lento puedan ser

atravesadas rápidamente. Así el sistema se queda atrapado en un estado que no es el más estable. Dado que es un proceso fuera de equilibrio, su tratamiento es complicado y la descripción de los detalles del proceso se consideran como uno de los temas abiertos más fundamentales de la física. Otro problema interesante del que se tiene relativamente poco entendimiento es cómo pueden surgir singularidades en el límite termodinámico si la mecánica estadística parte de potenciales y funciones de partición continuas.

Por sí sola la termodinámica provee herramientas invaluable para clasificar y predecir diversas características de las transiciones de fase. Dada la brevedad de este texto y la intención de este libro, no abordaremos aquí estos aspectos que pueden consultarse en cualquier referencia de termodinámica básica. Sólo recordaremos algunos elementos claves. El primero es la clasificación de las transiciones de fase según el orden de la derivada del potencial termodinámico de Gibbs que por primera vez presenta una discontinuidad. Las transiciones de primer orden presentan una discontinuidad en la primera derivada. Las transiciones de fluidez son generalmente de primer orden porque involucran discontinuidades en la densidad, siendo esta la inversa de la primera derivada de la energía libre respecto a la presión. Estas transiciones involucran un calor latente, es decir, la energía suministrada en forma de calor se utiliza para el cambio de fase y entonces la temperatura permanece constante durante el proceso. Las transiciones de segundo orden exhiben una discontinuidad en la segunda derivada de la energía libre, siendo la primera derivada continua. Ejemplos de ellas son las transiciones entre superfluidos, de metal a superconductor y la ferromagnética. Se caracterizan por tener respuestas divergentes ante perturbaciones externas así como correlaciones de variables que decaen como una ley de potencias con la distancia. Otro aspecto clave que nos provee la termodinámica es la predicción de algunas características generales de las transiciones como por ejemplo el número máximo posible de fases en coexistencia (regla de las fases de Gibbs), la derivada de las curvas de coexistencia de fases (ecuación de Clausius-Calpeyron), los criterios de estabilidad de las fases, etc.

Hasta aquí hemos mantenido en suspenso la razón por la cual ocurren las transiciones de fase. En realidad el paradigma existente es relativamente sencillo de entender. Se trata de una competencia entre orden y desorden. Cuando la temperatura es alta, los sistemas tienden a permanecer desordenados dado que los átomos o moléculas tienen mucha energía cinética. A medida que se baja la temperatura, domina la energía potencial que favorece el orden. Esta tensión entre orden y desorden queda de manifiesto al analizar la estructura de la energía libre. Imaginemos el caso sencillo de calentar un sistema manteniendo constante la presión. De acuerdo a la termodinámica, dado que la presión es constante, el sistema tendrá como fase estable la que minimice la energía libre de Helmholtz. Esta energía, denotada por $F[T,M]$, viene dada por,

$$F[T,M]=U[M]-TS[M]$$

siendo T la temperatura, $U[M]$ la energía interna y $S[M]$ la entropía. La M entre paréntesis cuadrados es una etiqueta para las posibles configuraciones del sistema. Inmediatamente notamos que si $T=0$, la energía libre es $F[M]=U[M]$. Esto indica que los estados del sistema observados serán los que minimicen la energía interna. Pero en general esa minimización se logra ordenando el sistema. Por otra parte, si crece T , eventualmente el término $-TS[M]$ dominará a $U[M]$. Así, $F[M]=-TS[M]$ y dado el signo menos de la energía libre, $F[M]$ se hará mínimo para estados M de entropía máxima (o de máximo desorden).

Dado que fases diferentes implican cambios en el orden interno, es claro que se deba buscar una manera de clasificar los tipos de orden. La manera natural de hacerlo es mediante el estudio de las simetrías. Pensemos en un gas dentro de un tanque. Las moléculas podrán visitar todos los puntos del

espacio dentro del tanque. En este sentido, todos los puntos así como las direcciones del espacio son equivalentes. Al bajar la temperatura el gas se solidifica y las moléculas se sitúan en posiciones fijas dentro de un cristal. Entonces los puntos del espacio dejan de ser equivalentes dado que en muchas regiones no serán observadas moléculas; la simetría translacional y rotacional se rompe.

Para ilustrar esto pensemos en una analogía deportiva. En el basquetbol todos los puntos de la cancha son visitados por jugadores mas o menos el mismo número de veces durante el partido. No sucede lo mismo en el béisbol donde los jugadores pasan la mayor parte del tiempo cerca de las bases. De este modo aparecen puntos privilegiados del espacio y se rompe la simetría espacial y rotacional. Así llegamos a una de las ideas centrales de las transiciones de fase; estas se caracterizan y clasifican por las simetrías que rompen. Atendiendo a esta idea, una vez que se localiza la simetría rota, puede utilizarse un parámetro, llamado de orden, que mide el grado de simetría de una y otra fase. Hacemos entonces que la variable M , usada para etiquetar estados en $F(T,M)$, sea el parámetro de orden. Existe un teoría debida a L.D. Landau que permite describir *cualquier transición de segundo orden* usando esta idea, y con algunas precauciones, puede ser aplicada a transiciones de primer orden. Landau produjo una energía libre fenomenológica basada en que el parámetro de orden es pequeño cerca de la transición y por lo tanto puede realizarse una expansión en series de potencias del mismo. Como ejemplo podemos tomar la transición de ferromagnetismo a paramagnetismo, es decir, de una fase con magnetización espontánea a una fase sin magnetización (en ausencia de campo magnético externo). En este caso el parámetro de orden M es la magnetización, obtenida de promediar todos los momentos magnéticos de los átomos. Desarrollando en serie de Taylor y tomando en cuenta algunas consideraciones de simetría así como la ausencia de campo externos, la energía libre $F[T,M]$ tiene la siguiente forma,

$$F[T,M]=a(T-T_c)M^2+bM^4$$

siendo a y b dos parámetros de la teoría, ambos positivos. T_c es la temperatura de la transición de fase. En efecto, como se ve en la Fig. 3, si se grafica a $F[T,M]$ para $T > T_c$, los términos cuadráticos y cuárticos tienen el mismo signo y $F[T,M]$ tiene su mínimo para $M=0$. Para $T < T_c$ el término cuadrático es negativo y aparecen dos mínimos, M_0 y $-M_0$, ambos distintos de cero, indicando así la aparición de magnetización espontánea. Es importante notar que hay dos mínimos. Un sistema real “escogerá” uno de ellos debido a fluctuaciones rompiendo entonces la simetría.

Otra característica importante es que la teoría indica la variación del parámetro de orden con la temperatura, i.e., como varían la posición de los mínimos con T ,

$$M_0(T)=0 \quad \text{si } T > T_c$$

$$M_0(T)= (a/2b)^\beta (T_c-T)^\beta \quad \text{si } T < T_c$$

El valor del exponente es $\beta=1/2$. Este es nuestro primer encuentro con los llamados exponentes críticos. Indican el escalamiento de las propiedades del sistema al acercarnos a la transición; por ejemplo, la susceptibilidad magnética varía como $(T-T_c)^{-1}$. Su estudio es en si mismo un tema de importancia capital no sólo en la termodinámica sino también para sistemas complejos. El valor $\beta=1/2$ es en general una característica de las transiciones de fase de segundo orden. No sólo se observa en sistemas magnéticos sino en muchos otros como en la transición de metal a superconductor. La teoría no es cuantitativamente correcta si las fluctuaciones térmicas son muy fuertes, tal y como ocurre en una dimensión (1D) y dos dimensiones (2D). Ello requiere técnicas mas avanzadas como el grupo de renormalización o la hipótesis de escalamiento.

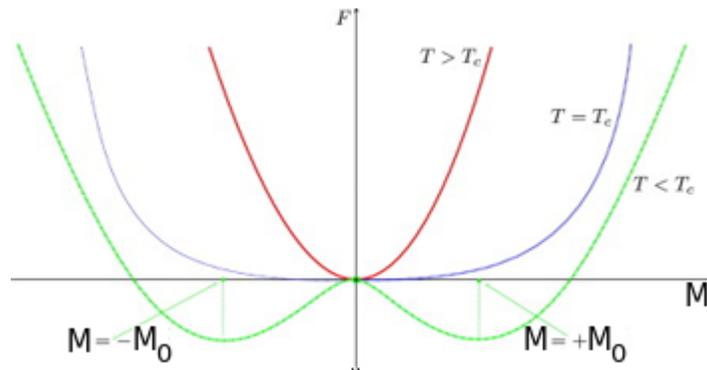


Fig. 3. Teoría de Landau para transiciones de fase de segundo orden. Aquí se grafica la energía libre de Helmholtz $F[T,M]$ en función del parámetro de orden M para tres temperaturas. Para $T > T_c$ el mínimo de la $F[T,M]$ está en $M=0$, mientras que para $T < T_c$ aparecen dos mínimos. Ambos tienen la misma energía libre. El sistema “escoge” uno de ellos por alguna fluctuación térmica y rompe entonces la simetría. Si la simetría rota es continua, aparecen modos de baja frecuencia llamados de Nambu-Goldstone.

Una pregunta importante es porqué la teoría de Landau es mas sencilla de aplicar para transiciones de segundo orden. La respuesta tiene que ver con la variación de los parámetros de orden al atravesar la transición. En las de segundo orden, el parámetro de orden es continuo con la temperatura, como en el caso visto anteriormente. Ello garantiza que el parámetro sea pequeño cerca de T_c y de ahí se sigue el desarrollo en serie de potencias. Puede demostrarse que este procedimiento es enteramente análogo a realizar una aproximación llamada de campo medio, donde cada integrante del sistema contribuye a generar un campo efectivo, el cual a su vez afecta a cada elemento. En cambio para las transiciones de primer orden, el parámetro de orden sufre un salto y no puede garantizarse su pequeñez. Cada caso particular requiere entonces un cuidadoso análisis, usualmente guiado por algún campo medio efectivo.

Es importante remarcar que el principio de rompimiento de simetría se aplica en muchos campos de la física. Una consecuencia importante de este rompimiento es la existencia de excitaciones de baja energía cuyas longitudes de onda tienden a infinito. Esto se debe al teorema de Goldstone el cual indica que si un Hamiltoniano tiene una simetría continua pero un estado base que rompe con dicha simetría, entonces aparecen estos modos de baja energía, llamados *de Nambu-Goldstone*. La razón física es sencilla de entender; como el Hamiltoniano tiene una simetría continua, pueden realizarse excitaciones que varían muy lentamente respecto a ella y por lo tanto tendrán poca energía. Los fonones acústicos, los cuales son vibraciones cuantizadas de baja frecuencia en los sólidos, corresponden a los modos de Nambu-Goldstone asociados al rompimiento de la simetría translacional. Explicado de otra manera, un cristal podría formarse en cualquier parte del espacio dado que su Hamiltoniano no depende de la posición. Por ello se dice que tiene una simetría continua. Sin embargo, cuando se forma un cristal este lo hace en una región determinada del espacio, rompiendo esta simetría. Hay muchos otros ejemplo de modos de Goldstone tales como los magnones o plasmones. Este mecanismo se extiende a otras ramas de la física. Citemos por ejemplo que los modos de Nambu-Goldstone del campo electromagnético son los *fonones* y desde luego el campo de Higgs da lugar al famoso *bosón de Higgs*. El mecanismo de Higgs explica justamente el proceso de creación de masa como un rompimiento espontáneo de simetría.

Menos conocida es la relación entre modos de Nambu-Goldstone y la rigidez de un sistema. En general, por cada simetría continua rota aparece una nueva rigidez, caracterizada esta por una constante elástica asociada. El papel de esta rigidez es justamente evitar la destrucción del nuevo orden debido a las fluctuaciones térmicas. Las transiciones de fases donde se revela con mayor claridad este hecho es

en las de fluidez, ya que como vimos anterioremente los fluidos se diferencian de los sólidos por su rigidez. Consideremos una fluctuación térmica que saque de su posición de equilibrio por una distancia x a unos átomos de la red. El esfuerzo mecánico, definido como la fuerza aplicada por unidad de área, requerido para producir esta deformación viene dado por la ley de Hooke, siendo Gx/a donde a es la separación interatómica y G es el módulo elástico que mide la rigidez mecánica del sólido. La fuerza requerida es entonces el esfuerzo por el área, es decir $-a^2Gx/a$. Esto puede reescribirse en términos de una constante elástica para un resorte efectivo haciendo $k = Ga$. Pero del teorema de la equipartición, en equilibrio térmico la energía promedio del oscilador $k\langle x^2 \rangle / 2$ será igual a $k_B T / 2$, siendo k_B la constante de Boltzmann. De este modo, llegamos a que el desplazamiento cuadrático medio $\langle x^2 \rangle$ está relacionado con la rigidez y la temperatura mediante la relación $\langle x^2 \rangle = k_B T / Ga$. Si alguna constante elástica se anula, $\langle x^2 \rangle$ será divergente, lo cual indica que los átomos visitarán todos los puntos del espacio, restaurando así la simetría que había roto el sólido. Notamos entonces que si un desplazamiento debido a una fluctuación térmica es del orden de la distancia interatómica, el orden se destruirá. Este desarrollo explica uno de los criterios mas simples pero poderosos para predecir la fusión de un sólido; esto ocurre cuando $(\langle x^2 \rangle)^{1/2}$ es aproximadamente 10% de la distancia interatómica. Se le conoce como criterio de Lindemann.

Tal y como estaba el paradigma del rompimiento de simetrías durante gran parte del siglo XX se creía imposible que pudieran existir transiciones de fase en sistemas bidimensionales y unidimensionales. Tampoco parecía posible tener sistemas ordenados bidimensionales con interacciones de corto alcance. Ello se debe a que si se estudia la mecánica estadística de estos sistemas, el desorden térmico tiene un efecto mucho mayor en 1D y 2D, destruyendo la posibilidad de orden. Pensemos en fichas de dominó paradas en fila. Al tirar una de ellas, todas las otras fichas se derrumban. De acuerdo a este paradigma, resultaba imposible concebir una transición de fase de un sólido hacia un superconductor o de un líquido hacia un superfluido en 2D. Sin embargo, a fines de los años 60's del siglo XX existían evidencias de estas transiciones. Por ejemplo se había observado una transición hacia un superfluido en superficies delgadas de He₄ líquido. El experimento en sí era muy ingenioso, consistente en medir el período de oscilación de un péndulo de torsión mojado por el He₄. La transición aparecía como un cambio súbito del momento de inercia del sistema. Otra evidencia eran la simulaciones computacionales con discos duros en 2D. Ellas indicaban una transición de fase pero con las computadoras de la época resultaba imposible dilucidar si realmente era un efecto que pudiera subsistir en el límite termodinámico. Esto sólo pudo lograrse hasta el año 2015, cuando finalmente el sistema se escaló de manera que la transición fuera resuelta sin ambigüedad. La situación puede resumirse en que los hallazgos indicaban una contradicción con el paradigma de transiciones de fase y rompimiento de simetría.

Fué por ese entonces cuando el joven J. M. Kosterlitz empezó a trabajar en el problema junto al ya por entonces famoso D. Thouless. La guía conductora en su trabajo era abordar el problema de la superfluidez con un modelo de espines llamado XY. Tal y como se observa en la Fig. 4, en este modelo los espines están anclados sobre los sitios de una red cuadrada pudiendo girar a cualquier ángulo entre 0° y 360°. Existe una interacción de cada espín con sus primeros vecinos en la red. La energía de cada configuración viene dada por su Hamiltoniana,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$$

siendo θ_j el ángulo que forma el espín del sitio j con el eje x , J es la escala de energía y la suma se extiende a todas las posibles parejas de primeros vecinos en la red cuadrada (ver Fig. 4).

Puede demostrarse que este modelo es análogo al de un superfluido. La primera tarea de Kosterlitz y Thouless fué demostrar que las excitaciones de los espines forman vórtices, es decir, son una especie de “huracanes” donde los espines giran alrededor de una singularidad. Lo interesante de estas excitaciones es que no hay una dirección privilegiada del espacio, sino sólo puntos donde hay singularidades del parámetro de orden. Una vez hecho esto, Kosterlitz y Thouless demostraron que los vórtices se apareaban a bajas temperaturas, existiendo una temperatura arriba de la cual los vórtices se desapareaban. Lo interesante de la transición es que no rompía ninguna simetría. Mas bien se asocia a al apareamiento de las singularidades llamadas *defectos topológicos*. En su aparición es fundamental considerar las condiciones de frontera; sólo el sistema finito presenta estas singularidades. El nombre de topológico viene en parte de ello como veremos a lo largo del capítulo.

Actualmente, esta transición se conoce como de Kosterlitz-Thouless, y se considera el inicio del estudio de la transiciones de fase topológicas, razón por la cual les fué otorgado el Premio Nobel de Física 2016, junto a Haldane quien aplicó estas ideas a sistemas magnéticos. Al mismo tiempo, el trabajo de Kosterlitz-Thouless abrió la brecha necesaria para empezar a romper el paradigma de la ausencia de transiciones de fase en 2D. Eventualmente el paradigma se acabó de romper con el descubrimiento del grafeno. Este material está formado por átomos de Carbono ordenados en un arreglo geométrico similar a la estructura de un panal de abeja con la particularidad de tener un sólo átomo de espesor. Su descubrimiento por Geim y Novoselov lea valió el Premio Nobel de Física 2010. El premio fué otorgado en un tiempo récord, menos de 10 años. Las razones son múltiples; por un lado rompió el paradigma teórico existente, por el otro resultó tener propiedades físicas sobresalientes que le han merecido el título del material maravilla. Por si fuera poco, los portadores de carga en el grafeno son gobernados por ecuaciones efectivas de tipo cuántico-relativistas con características únicas y observables. Además abrió el camino para el descubrimiento de muchos otros materiales en 2D como el fosforeno, siliceno, dicalcogenuros de metales de transición, etc. Estos materiales está provocando una verdadera revolución dado que presentan una gama enorme de comportamientos susceptibles de ser aplicados en muchas areas tecnológicas. Más aún, el apilamiento de capas de cristales en un tema de investigación de frontera, y como veremos posteriormente, ha tenido también un papel importante en la física fundamental.

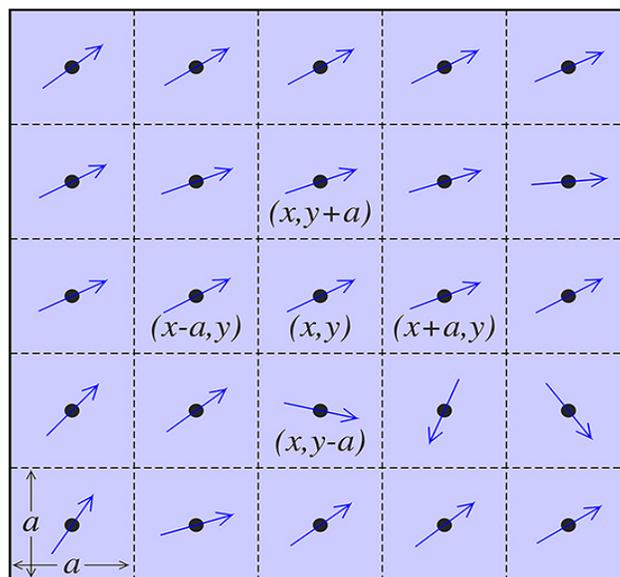


Fig. 4. Modelo XY. En cada sitio de la red cuadrada hay un espín que puede girar de 0 a 360° grados. Cada espín interactúa con sus primeros cuatro vecinos. Aquí se representa un espín en la posición (x,y) que interactúa con sus cuatro vecinos situados a una distancia dada por la distancia entre sitios (a).

El estudio del modelo XY llevaría a Thouless a otro problema relevante que no había sido entendido a mediados de los años 70's del siglo XX. Era el llamado efecto Hall cuántico. Clásicamente se puede describir como la deflexión que sufre una corriente eléctrica en una lámina de metal cuando ésta se somete a un campo magnético uniforme perpendicular al plano de la lámina. Viendo la Fig. 5, consideremos primero el caso con campo eléctrico sin campo magnético. Al aplicar un campo eléctrico E_x en la dirección x, aparece en la misma dirección una densidad de corriente (j_x) dada por $j_x = \sigma_{xx} E_x$ donde σ_{xx} es la conductancia y su inverso la resistividad $\rho_{xx} = 1/\sigma_{xx}$. Cuando se enciende un campo magnético uniforme B_0 en la dirección z, las cargas son deflectadas por la fuerza de Lorentz en la dirección perpendicular a los campos E_x y B_0 . Se produce entonces un voltaje V_H en la dirección perpendicular al campo eléctrico (ver Fig. 5). A este efecto se le conoce como Hall. La corriente perpendicular al campo eléctrico viene dada por $j_y = -\sigma_{yx} E_x$, donde σ_{yx} es la llamada conductancia de Hall; su inversa es la resistividad de Hall $\rho_{xy} = 1/\sigma_{yx}$.

Landau fué el primero en estudiar este problema desde un punto de vista cuántico para un gas de partículas libres cargadas en 2D. Usando la ecuación de Schroedinger, Landau llevó el problema a un oscilador cuántico unidimensional. Los niveles energéticos E están cuantizados y vienen dados por $E = (n + 1/2) h \nu$, donde n es un número entero, h es la constante de Planck y ν es una frecuencia, conocida como de ciclotrón dada por $\nu = 2\pi e B_0 / m_e$, siendo e la carga del electrón y m_e su masa. A estos estados cuánticos se les conoce como niveles de Landau, cuyo cálculo fué formulado alrededor de 1935.

A principios de 1970, G. Wannier le propuso a D. Hofstadter una tesis doctoral basada en la tarea de formular el mismo problema pero asumiendo cargas moviéndose en un cristal en 2D. Al considerar una red cristalina, Hofstadter se dió cuenta que había otro parámetro introducido al sistema, dado por la distancia interatómica a . Ello hacía que hubiera una competencia entre el flujo magnético debido al campo en una celda unitaria, a saber $B_0 a^2$ y el flujo magnético cuántico h/e^2 . Al igual que Landau, Hofstadter quería encontrar los estados permitidos y la energía, para ello logró

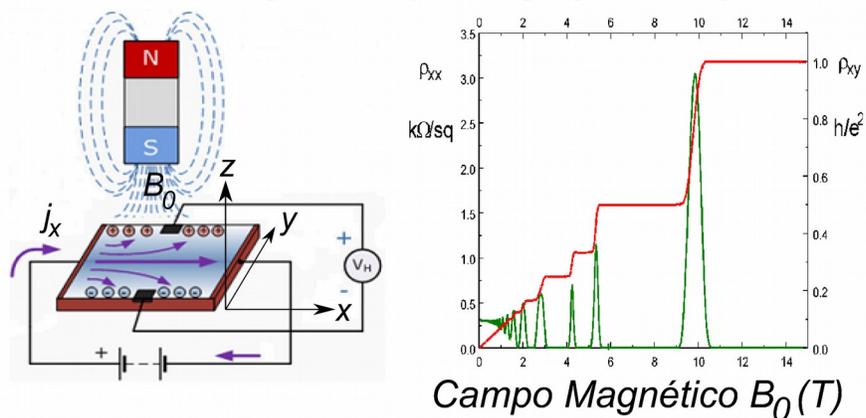


Fig 5. Panel izquierdo: dispositivo experimental para observar el efecto Hall clásico. Se coloca un metal sometido a un campo magnético uniforme, representado aquí por un imán. Al aplicar un campo eléctrico en la dirección x aparece una corriente. Las cargas se deflectan y aparece un voltaje de Hall V_H en una dirección perpendicular. **Panel derecho:** resistividades en las direcciones x y y en función del campo magnético aplicado medido en Teslas para el

efecto Hall cuántico. Los picos corresponden a ρ_{xx} mientras que la curva con saltos y mesetas corresponde a ρ_{xy} . Las mesetas tienen una altura dada por $\rho_{xy} = 1/\sigma_{yx} = 1/(C_r e^2/h)$.

mapear el problema a una ecuación análoga a la de osciladores unidimensionales clásicos acoplados. La ecuación contenía como parámetro fundamental la razón entre flujos magnéticos $\Phi = B_0 a^2 / (h/e^2)$.

Para campos poco intensos, donde el reticulado del cristal no es importante, Hofstadter logró recuperar los niveles de Landau. En el caso general, la ecuación era periódica cuando Φ era un número racional, pero la solución no era trivial y se recurrió entonces a una solución numérica. Sin duda D. Hofstadter fué la persona mas apropiada para la tarea, no sólo por su experiencia en computadoras sino por su bagaje matemático que le permitió reconocer una gran riqueza en el problema. En particular logró darse cuenta de la naturaleza autosimilar del espectro de energías E en función de la razón entre flujos magnéticos, tal y como se observa en la Fig. 6. El mismo Wannier era escéptico sobre este espectro, hoy llamado *mariposa de Hofstadter*, pero R. Feynman reconoció de inmediato la importancia del descubrimiento. El momento del descubrimiento no pudo ser mas apropiado; en ese entonces se estaba desarrollando la teoría de fractales y caos. La mariposa fue así el primer fractal descubierto en el estado sólido. Pero los problemas resueltos por Landau y Hofstadter se consideraban imposibles de ser observados por varias razones. La primera es que no existían sistemas bidimensionales como los requeridos y la segunda es que tal y como estaba la teoría, se predecía que no podrían existir corrientes dado que los sistemas era aislantes. El caso de Hofstadter era aún mas complejo puesto que la fractalidad sería observable sólo con campos magnéticos demasiado intensos para los obtenidos en la realidad.

Sin embargo en 1980 K. von Klitzing medió la cuantización de los niveles de Landau usando un transistor de efecto de campo metal-óxido-semiconductor (MOSFET). La idea básica fué lograr un canal de conducción que se comportara de manera efectiva como un sistema bidimensional. Como se muestra en la Fig. 5, von Klitzing encontró el sorprendente resultado de que la conductancia estaba cuantizada, es decir, $\sigma_{yx} = C_r (e^2/h)$ donde C_r es un número entero. Este descubrimiento le valió el Premio Nobel de Física en 1985 y actualmente tiene muchas aplicaciones, la mas obvia es medir la relación entre las constantes fundamentales e y h .

Se reconoció que el problema era análogo al de transiciones de fase dado que el sistema podía ser aislante o conductor, en este último caso con conductancias cuantizadas, bajo diferentes variables externas al sistema, en este caso los campos magnéticos y eléctricos aplicados. Estas conductancias podían ser las mismas para diferentes combinaciones de los campos, existiendo discontinuidades entre diferentes regiones. Esto llevó a la idea de *fases cuántica*, donde los electrones se organizan cuánticamente de modo que pueda obtenerse una conductancia dada. La temperatura no controla las transiciones de fases cuánticas, sino el cambio de algún parámetro del sistema como los campos externos o una concentración de dopaje químico. Una vez mas, las transiciones de fase se deben a la competencia de dos mecanismos. Por un lado si bien los electrones son partículas puntuales, sus estados ocupan cierto espacio. Clásicamente, un electrón bajo un campo magnético gira en un círculo de Larmor, el cual puede tener cualquier radio. Cuánticamente, como la energía está cuantizada, puede demostrarse que los electrones toman un área del orden $2\pi^2/eB_0$. Contrapuesto a esto los electrones deben permanecer alejados unos de otros por ser fermiones, ya que no pueden ocupar el mismo estado cuántico. Así, cada electrón no sólo necesita espacio, sino que cada uno necesita *su propio espacio*. De hecho, A. Zee en su libro "Quantum Field Theory in a Nutshell" describe al efecto Hall cuántico como "un especie de crisis de vivienda, o como el problema de asignar espacio de oficina en un Instituto de Física Teórica a visitantes que no quieren compartir la oficina".

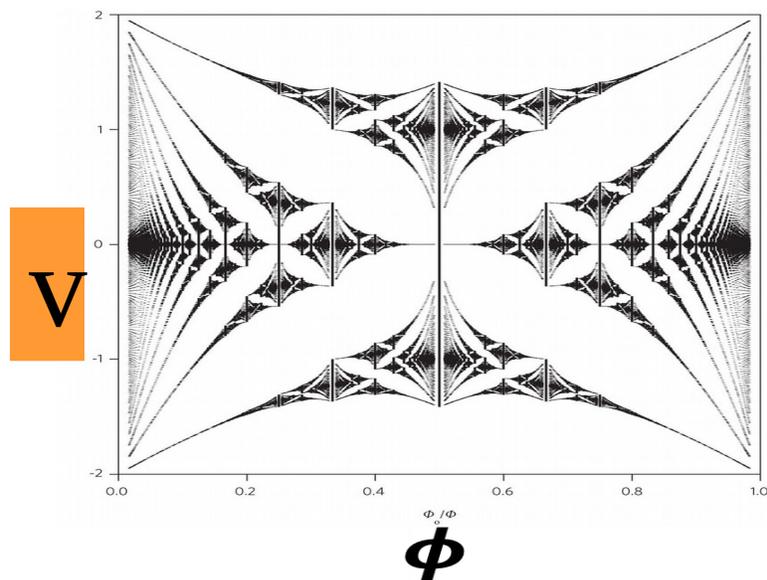


Fig. 6. Mariposa de Hofstadter. En el eje de las abscisas aparece la razón entre flujo magnético de la red y el flujo cuántico elemental, mientras que en las ordenadas está la energía de los electrones. Para una red dada, puede pensarse que está es la relación entre voltaje aplicado (V) contra el campo magnético. Los estados permitidos aparecen marcados en negro. Las regiones en blanco, con forma de alas de mariposa, son regiones prohibidas para los electrones.

Una vez descubierto el efecto por Von Klitzing, subyacía la predicción teórica de la naturaleza aislante del sistema. Además se necesitaba obtener el número de cuantos C_r en función de las variables externas del sistema, es decir, el diagrama de las fases cuánticas. Finalmente los teóricos lograron darse cuenta de lo esencial de considerar la superficie del sistema. Es decir, el sistema es aislante si no tiene superficie pero se vuelve conductor al cortarlo. Los responsables de la conducción son modos superficiales. Eventualmente se demostró que el número de modos superficiales está cuantizado, sirviendo como una especie de carriles para los electrones.

Tal vez lo mas sorprendente fué el hecho de que cuando Thouless, junto con M. Khomoto, Nightingale y den Nijs finalmente lograron obtener el diagrama de fases cuánticas, la fórmula para encontrar al entero C_r tenía exactamente la forma de otra fórmula proveniente de la topología. Esta fórmula permite calcular el número de agujeros de una superficie. Debe decirse que la topología es la rama de las matemáticas que estudia las propiedades de superficies e hipersuperficies cuando se deforman sin cortar y pegar. La idea es analizar que propiedades permanecen fijas y cuales varían al producir deformaciones. De este modo, una dona y una taza son equivalentes por poseer un agujero, mientras que una esfera y un plato no poseen agujeros. Por ello una dona puede deformarse en una taza pero no en una esfera. Es notable también que los cambios sólo pueden ocurrir con saltos dado que no existen “fracciones de agujero”.

En vista de esto, resultó claro de que cada fase cuántica estaba caracterizado por un invariante topológico. A C_r se le conoce como el número de Chern. En la Fig. 7 podemos ver la representación de las fase cuánticas y la conductancia asociada a cada una de ellas, así como el número de agujeros asociados a cada fase. Si comparamos con la Fig.7, es revelador darse cuenta que el diagrama ocupa las

zonas en blanco de la mariposa de Hofstadter. La razón es que la mariposa se calcula para sistemas infinitos que son aislantes, mientras que la conducción aparece para el sistema finito. Los estados de superficie aparecen siempre en las zonas prohibidas del sistema infinito. Topológicamente el sistema infinito o con condiciones periódicas es distinto al finito justamente por tener un corte. Además, siendo la topología una propiedad rousa, la existencia de defectos en la red o de una superficie rugosa no afecta la conductancia. Se dice que los estados están *topológicamente protegidos*.

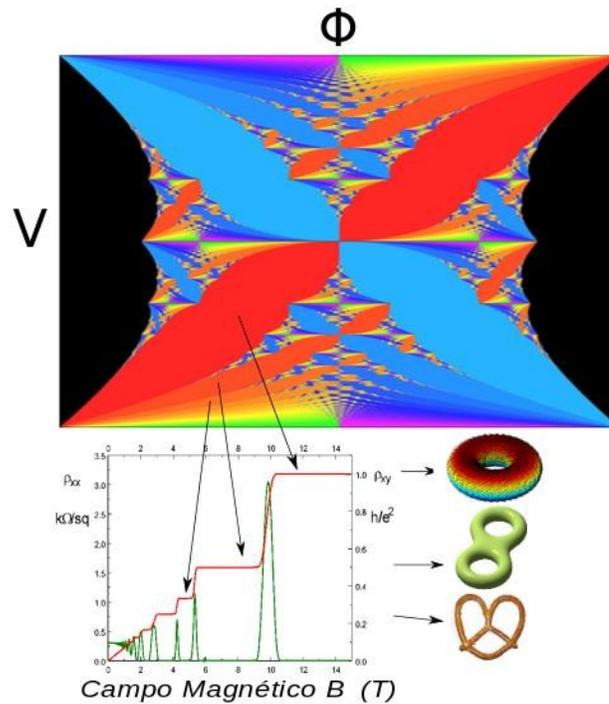


Fig. 7. Diagrama de fases del efecto Hall cuántico en función del voltaje aplicado contra la razón de flujos magnéticos. Cada zona de diferente color representa una fase con la misma conductancia de Hall, indicada en la gráfica de conductancia en función del campo magnético aplicado. A cada fase le corresponde un invariante topológico. Aquí se muestran tres ejemplos; con 1 agujero (dona), 2 agujeros (lente) y tres agujeros (pretzel). Notar que estas fases cuánticas corresponden a las zonas en blanco de la mariposa de Hofstadter. La razón es que la conducción se dá en estados de superficie, los que se producen siempre en energías no permitidas del sistema infinito.

Desde que Von Klitzing midió la conductancia de los niveles de Landau se han investigado diagramas en muchos otros sistemas. Por ejemplo, una vez entendido el efecto Hall cuántico se encontró que los electrones pueden interaccionar entre sí, de modo que C_r pueda tener valores fraccionarios (llamado efecto Hall fraccionario). También se planteó la posibilidad de tener un efecto Hall sin campo en 1987, lo cual se logró mediante la construcción de un material diseñado ex profeso en el año 2007. A este efecto se le llama de Hall anómalo y marcó el despegue del campo de los aislantes topológicos como uno de los temas mas relevantes de la física contemporánea. Actualmente se trabaja en modos de superficie con polarización de espín para usarlos en el campo de la espintrónica y la computación cuántica. Como cereza del pastel, en el año de 2014 finalmente se pudo medir la mariposa de

Hofstadter usando para ello grafeno sobre otro cristal bidimensional, nitruro de boro (h-BN). El nitruro de boro induce deformaciones en el grafeno. A su vez, las deformaciones son equivalentes a campos magnéticos efectivos de una magnitud mucho mayor que la de cualquier magneto. Este experimento marca además el despegue de otra área de interés científico y tecnológico: la “deformatrónica”.

Para concluir diremos que las ideas esbozadas en este capítulo pueden extenderse a muchas áreas de la ciencia. Las fases de los modelos de espín se pueden utilizar para entender votaciones, alianzas, guerras e inclusive el comportamiento del cerebro o la evolución de las especies. También en cosmología y altas energías juegan un papel importante. En su evolución el universo ha presentado sucesivas transiciones que han roto simetrías, como la del campo electrodébil hacia el campo electromagnético que observamos hoy en día. La ubicuidad del tema lo hace indispensable en la formación de todo físico; tanto así como el sabio consejo de Sor Juana tomado de Lupercio Leonardo *”bien se puede filosofar y aderezar la cena”*.

Para saber mas

Statistical Mechanics, Kerson Huang. 2a. Edición. Ed. John Wiley & Sons., New York, 1987.

Entropy, Order Parameters and Complexity, J.P. Sethna, Oxford Master Series in Statistical, Computational and Theoretical Physics, Ed. Oxford University Press, Oxford, 2006.

Advanced Solid State Physics, Phillip Phillips, 2nd. Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2012.

