NUMEROS, ATOMOS Y ESTRELLAS

A. Córdoba, C. Fefferman y Luis A. Seco

¿Qué es un átomo? Dependiendo de quién se formule la pregunta, la respuesta puede variar ostensiblemente su grado de dificultad. Para Demócrito parecía bastante claro: la materia estaba compuesta por partículas indivisibles que denominó átomos. Esta idea fue objeto de reflexión y revisión a lo largo de los siglos, durante los cuales la ciencia experimental, que apenas existía, se mantuvo ausente.

La situación cambió *drásticamente* a finales del siglo XIX, cuando los experimentos empezaron a crear una plataforma desde la que se pudo establecer científicamente la naturaleza de los átomos, sobre todo a partir de la irrupción de las ideas cuántica a principios del siglo XX,.

Se puede decir que, si bien los átomos nacieron para la filosofía hace mas de 20 siglos, para la ciencia, y muy especialmente para la física, apenas cuentan con cien años de vida.

El progreso originado a raiz de las preguntas primero, y de las respuestas más tarde, de que es responsable la teoría cuántica ha sido impresionante, hasta el punto que la física y química cuánticas se han convertido en una de los pilares sobre los que se fundamenta la vida contemporánea.

El estudio de los átomos, sin embargo, no acabó aquí. Los descrubimientos de Plank, Fermi, Heisenberg, Schrödinger, Dirac y muchos otros, generaron un esfuerzo concertado para establecer, de acuerdo con el rigor matemático más estricto, su naturaleza y propiedades. La situación fue especialmente favorable: después de varios intentos, la formulación cuántica de Heisenberg y Schrödinger utilizaron de manera fundamental el arsenal matemático introducido tan solo unos años antes para dar explicaciones estrictamente matemáticas a cuestiones clásicas, como la óptica y el electromagnetismo.

Esta actividad constituyó el embrión que se convertiría años más tarde en una nueva disciplina, la *Física Matemática*. Lejos de ser un nuevo paso en la tendencia, iniciada en el siglo XVIII, de subdividir la ciencia en especialidades cada vez más independientes y perfectamente delimitadas (Biología, Física, Geología, Matemáticas, Química, etc.), la

Física Matemática supuso quizá un primer paso hacia el proceso de reestructuración de la ciencia moderna, en el que predomina un enfoque más global e inderdisciplinario de los problemas. La teoría cuántica, la mecánica estadística, la ingeniería de polímeros, la matemática financiera, la biología computacional y los algoritmos genéticos son ejemplos de ramas de la ciencia moderna que no son fácilmente clasificables de acuerdo con la distición a la que estamos acostrumbrados en los departamentos universitarios. La lista aqui mencionada es, por supuesto, incompleta; más aún, esta limitada a aquellos temas en los que las matemáticas, junto posiblementa a otras ciencias, desempeñan un papel fundamental.

El método matemático. La principal diferencia entre las matemáticas y el resto de las ciencias estriba en que el criterio de certeza viene dictado únicamente por la lógica, por la deducción rigurosa. Cuando un científico analiza sus experimentos, hace cálculos, interpretaciones fenomenológicas y predicciones, es frecuente que utilice las matemáticas de manera fundamental, incluso bastante sofisticada. Nadie discute este precioso papel de las Matemáticas en la Ingeniería, la Física o la Química. Pero no es ésta la tarea que nos interesa resaltar ahora, sino el saber si podemos entender y describir en términos matemáticos las distintas teorías científicas y cuales son las ventajas que lograríamos en ese empeño.

Cuando la física y la química ya tiene una teoria cuántica establecida, que permite hacer predicciones con approximaciones sorprendentemente buenas, la insistencia de los matemáticos de continuar persiguiendo las bases sobre las que fundamentar y derivar de manera rigurosa las fenómenos cuánticos, puede parecer redundante. Pero no lo es, y por diversos motivos. Uno de los papeles de las matemáticas en la dinámica científica, desde hace ya varios siglos, ha sido el de explicar, dentro de su cohesión interna, los fundamentos sobre los que edificar teorías ya conocidas. Y es precisamente éste papel el que ha producido los más variados y sabrosos frutos científicos a lo largo de la historia.

Una de las cimas de la ciencia griega son *Los Elementos* de Euclides que, entre otros méritos, contiene una presentación del métodod axiomático: Euclides enuncia unas pocas propiedades de naturaleza evidente, o axiomas, a partir de los cuales se deduce todo los demas. Por ejemplo: *por dos puntos pasa una unica linea recta.* Entre dichos axiomas, habia uno, el llamado *de las paralelas*, que desde un principio pareció menos obvio que los demás. Dice así: por un punto exterior a una recta sólo podemos trazar una paralela. El por qué a los griegos les parecia menos evidente que los demás es un misterio; quizá podemos conjeturar que en un mundo más pequeño como era el de la Grecia clásica, donde viajar resultaba azaroso y donde no estaba claro en que consistian los confines del mundo conocido, un axioma cuya verificación implicaba considerar largas distancias resultaría sospechoso. Esto son especulaciones, pero la realidad es que durante muchos siglos fue un objeto del deseo encontrar una demostración rigurosa de este axioma a partir de los demás. La respuesta dada por Gauss, Bolyai y Lobachetsky, tuvo que esperar hasta el siglo XIX y dió lugar a una revolución científica, a una nueva concepción del espacio y del tiempo. Tanto es así, que Gauss renunció a publicar sus trabajos sobre el tema, por miedo a la reacción de la iglesia protestante alemana. Su respuesta consitió en algo tan simple como la construcción de otras *geometrías*, donde todos los axiomas se cumplen *excepto* el de las paralelas. Algunos de estos modelos parecen mundos extraños, pero otros resultan tan naturales a la experiencia humana como la geometría de la superficie de la Tierra.

Este nuevo punto de vista trajo conceptos tan importantes como los de curvatura, geodésicas y la creación de nuevos espacios con geometrías distintas. Estas ideas fueron retomadas por Minkowski, Poincaré y, sobre todo, Einstein en su teoría general de la relatividad y supusieron un replanteamiento moderno de las dudas griegas: *¿Cuál es la geometría de nuestro universo?*. Se trata de una pregunta fácil con una respuesta muy complicada, y de hecho, hoy por hoy, incompleta, pero que pone de manifiesto el papel que juega en la dinámica científica el afán matemático de entender y clasificar cuestiones aparantemente triviales, como puede parecer a simple vista el axioma de las paralelas.

Puntos en el retículo Consideremos el siguiente problema. Supongamos que estamos en un plano que hemos cubierto con baldosas cuadradas de lado 1 centímetro. ¿Cuántas baldosas de esas hay dentro de un círculo de un radio R muy grande, digamos de 1 kilómetro?. La respuesta precisa a esta pregunta no se puede expresar de manera sencilla, pero una respuesta aproximada es fácil de obtener: como cada baldosa tiene area 1, simplemente dividimos el área del circulo, πR^2, entre el area de cada baldosa, teniendo ciudado de que R esté expresado en centímetros. Con la excepción de las baldosas cerca de la frontera del círculo, que en proporción son pocas, esta manera de contar da una respuesta satisfactoria, con un error relativo aproximado de $1/R$ por ciento. Podemos expresar esta relación de manera esquemática de la manera siguiente:

$$\text{número de puntos} = \pi\, R^2 + \text{error}$$

donde el error en este caso es parecido $2\pi R$, que en proporción es mas pequeño.

Sin embargo, esta pregunta es más transcendente de lo que pueda parecer a primera vista: si la geometría en la que estamos no es euclídea, el número de baldosas cerca de la frontera puede ser parecido al número de baldosas en el interior. Dicho de otro modo, en un país de geometría no euclidea, la longitud de sus costas es parecido al area del interior (caso de Noruega, pero por motivos distintos). En particular, el error mencionado antes podría ahora ser comparable al termino del area, lo que haría a esta manera de contar completamente inútil.

Si llevamos éste problema al caso del universo en el que vivimos, donde las baldosas son reemplazadas por estrellas, y los circulos grandes por galaxias, el problema se complica ostensiblemente, por supuesto, pero muchas de las cuestiones fundamentales permanecen. Con un buen estudio del problema de los puntos del retículo, podríamos en principio intentar contar estrellas en galaxias y de esa manera intentar adivinar en qué tipo de geometría vivimos. Esto constituye un esfuerzo altamente complicado, pero la respuesta parece ser que a distancias cortas, las que observamos a diario, la geometría es euclídea, pero a distancias mucho mayores, intergalácticas, no es así.

Este problema no sólo tiene aplicaciones geométricas y cosmológicas, como hemos explicado aquí, sino también, entre muchos otros, a problemas de contar nodos de oscilaciones en ingeniería, y, como explicamos más adelante, a problemas cuánticos relacionados con los orbitales electrónicos.

Química y Matemáticas. La escuela pitagorica (siglo VI AC) creía literalmente que los números eran los componentes últimos del universo, los ingredientes efectivos de todos los objetos materiales. Hoy en día esto parece exagerado, pero a aquellos maravillosos griegos no les impidió hacer descubrimientos aritméticos fundamentales, ni formular problemas y conjeturas plausibles, algunas de las cuales todavía constituyen un desafío al ingenio humano.

El punto de vista reducionista considera que el conocimiento de las ecuaciones de la Física, o primeros principios, y la posesión de métodos matemáticos adecuados nos permitirían deducir las propiedades físico–químicas del mundo que nos rodea. Si bien esta filisofía puede ser considerada tan radical como la pitagórica, lo cierto es que las diversas teorías científicas, pálidas aproximaciones a la ensoñada teoría del todo, describen bastante bien determinados aspectos de la vida cotidiana y de nuestra propia existencia.

Uno de los problemas con los que se encuentra la mecánica cuantica es que, a pesar de que sus ecuaciones predicen con gran precision determinados fenómenos atómicos, dichas ecuaciones son al mismo tiempo muy difíciles de resolver. Esto tuvo como consecuencia una intensa actividad para entender las soluciones con diversos grados de aproximación. Hartree, Fock, Thomas, Fermi, Slater y Dirac son algunos de los que se encargaron de estudiar diversas aproximaciones.

Otro de los problemas con los que se enfrenta la teoria cuántica es la explicación de fenómenos cualitativos. ¿Por qué la materia es estable?, ¿Por qué la materia es neutra?, ¿Por qué algunos elementos se forman en moléculas, mientras otros permanecen en forma atómica?, si el universo empezara de nuevo, y tuvieramos electrones y protones, ¿se formarían átomos?, ¿Qué son los orbitales electronicos?. Si no nos conformamos con explicaciones fenomenológicas, y pedimos una respuesta rigurosa, una deducción matemática a partir de los primeros principios, nos encontramos con su dificultad intrínseca, y de la enorme cantidad de ideas y herramientas matemáticas que su respuesta involucra.

El problema de los puntos del retículo, a la larga, desempeña un papel fundamental en los dos tipos de problemas arriba mencionados. Por una parte, y de modo muy somero, el problema de la aproximación a las ecuaciones cuánticas por otras más manejables nos recuerda el hecho que, mientras que contar puntos en el retículo es difícil, calcular la aproximación dada por el volumen del círculo no presenta ninguna dificultad. La similitud no acaba ahí: la naturaleza oscilatoria que se encuentra en la idea de los orbitales electrónicos, y en la estructura de la tabla periódica de los elementos está íntimamente ligada también al error cometido al contar puntos del reticulo.

La razón por la cual problemas básicos como el de los puntos del retículo aparecen en situaciones tan dispares como las arriba mencionadas puede no estar clara, pero una cosa es segura: en nuestros intentos por entender la naturaleza de un modo matemático, preguntas profundas, de ubicuidad misteriosa, seguirán planteándo desafíos al ingenio humano. Las astucias de la razón y las ideas necesarias para entender sus respuestas han llevado, y lo seguirán haciendo, a cambiar nuestros puntos de vista respecto al tiempo y al espacio. La reflexión sobre problemas matemáticos fundamentales, desde una prespectiva científica amplia y actual, constituye una de las claves en el proceso de enriquecimiento de nuestro conocimiento y dominio del universo. de la