

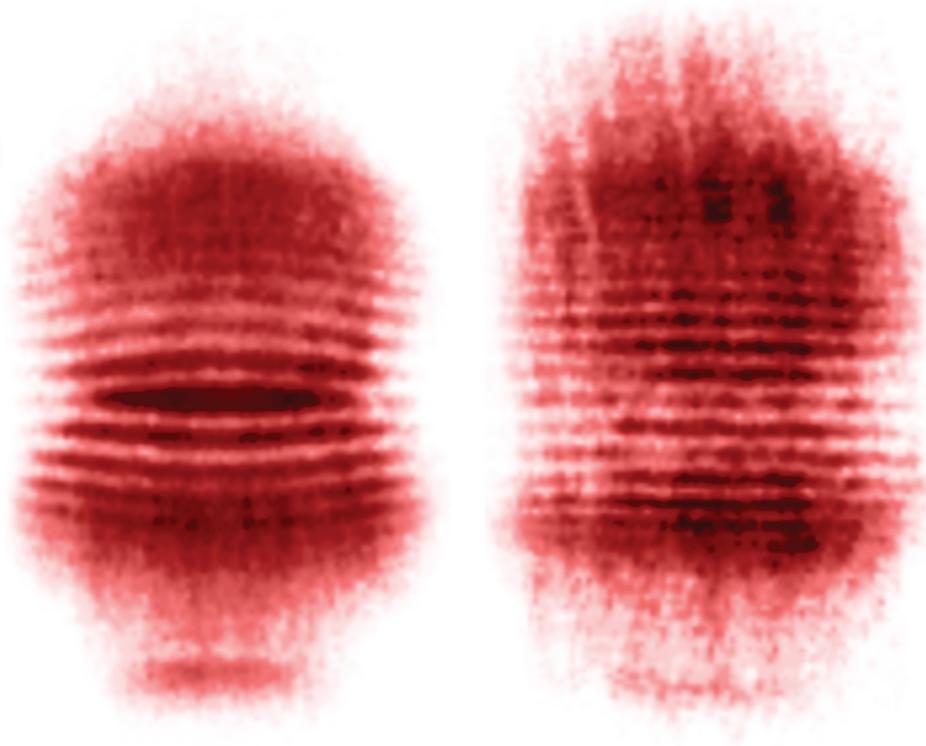
El

Glución

Las grandes preguntas de la Física

Publicación del Instituto de Física, UNAM

Febrero 2011, No. 15



INTERFEROMETRÍA ATÓMICA

FUENTES DE LUZ... ¿PARA MÉXICO?

LA IMPORTANCIA DE LA SUPERFICIE



Índice

Interferometría Atómica <i>Rocío Jauregui Renaud</i>	[3]
Fuentes De Luz... ¿Para México? <i>Matias Moreno Yntriago</i>	[7]
La Importancia De La Superficie <i>Gabriela Alicia Diaz Guerrero</i>	[12]

Directorio



Dr. José Narro Robles
Rector

Dr. Sergio M. Alcocer Martínez de Castro
Secretario General

Lic. Enrique del Val Blanco
Secretario Administrativo

Dr. Carlos Arámburo de la Hoz
Coordinador de la Investigación Científica

Guillermo Monsivais Galindo
Director

Comité Editorial

Raúl Esquivel Sirvent
Guillermo Ramírez Santiago
Mercedes Rodríguez Villafuerte
Victor Romero Rochin
Manuel Torres Labansat

.....

El Gluón, las grandes preguntas de la física,
es una publicación del Instituto de Física.
Prohibida la reproducción parcial o total
del contenido, por cualquier medio impreso
o electrónico sin la previa autorización.

Dulce María Aguilar Téllez
Diseño Gráfico y Formación

Gustavo Gómez Macías
Desarrollo Web

Mario Monroy Escamilla
Apoyo Técnico

INTERFEROMETRÍA ATÓMICA

En un curso básico de óptica aprendemos que dos o más ondas luminosas pueden combinarse para formar un patrón de regiones claras y oscuras, las que corresponden a posiciones en que los campos electromagnéticos de luz han interferido de manera constructiva y destructiva, respectivamente. Estos patrones pueden generarse, por ejemplo, realizando el experimento de la doble rendija de Young esquematizado en la Figura 1.

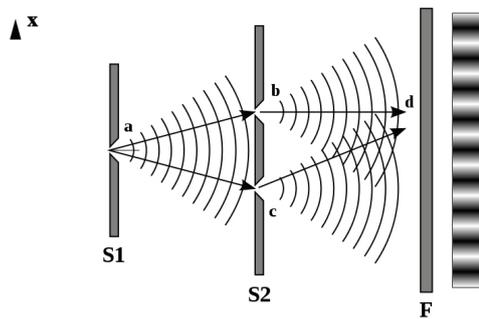


Figura 1. Experimento de la doble rendija de Young.

El maestro explica que la propiedad clave de los campos electromagnéticos detrás de este fenómeno es el *principio de superposición* y da argumentos para entender la estructura del patrón de interferencia en términos de la configuración experimental que da origen a este patrón, en particular la longitud de onda de la luz que en el rango visible está entre 390 y 750 nm aproximadamente. Para fortuna de todos, en los cursos siempre habrá un alumno observador que preguntará por qué el fenómeno de interferencia parece no manifestarse cotidianamente. Es decir, por qué algunos campos de luz, tales como los producidos a partir de una única fuente láser, producen patrones de interferencia y otros, como la luz solar, al parecer no producen interferencia. Esta pregunta será ideal para aclarar que los estados de la luz no son únicos e introducir el concepto de *coherencia óptica*, que precisamente cuantifica, en términos de funciones de correlación del campo electromagnético, la capacidad de una onda de luz para producir patrones de interferencia. La luz de un láser se encuentra en un estado altamente coherente mientras que la luz solar está en un estado esencialmente térmico y es sólo parcialmente coherente.

En cursos posteriores, quizá ese mismo alumno se pregunte, como lo hizo G. I. Taylor en 1909,¹ ¿qué ocurre si el experimento de Young se realiza con una fuente de luz que genera a lo más un sólo fotón durante el tiempo de tránsito de éste a través del interferómetro?

La implementación del experimento con fuentes y detectores de un solo fotón es reciente.² El resultado en la pantalla de detección es semejante al que se muestra en la Figura 2, formándose el patrón por la acumulación de puntos discretos cada uno de los cuales registra el arribo de un solo fotón. La luz se comporta como un raudal de *partículas* que se acumulan progresivamente en la pantalla de detección, de tal suerte que reconstruyen las franjas de interferencia explicada en la teoría *ondulatoria*.

El experimento de la doble rendija de Young se realizó únicamente con fuentes de luz hasta que, en 1961, C. Jönsson utilizó electrones³. Los experimentos con fuentes que emiten un electrón a la vez y detectores que discriminan cada electrón⁴ también requirieron el paso de algunos años. Los resultados son acordes a lo predicho por la *teoría cuántica* de la *materia*, que le asocia a ésta propiedades *ondulatorias*. En el régimen de una partícula a la vez, los patrones de interferencia ópticos y de electrones se van formando progresivamente tal y como ilustra la Figura 2. Experimentos semejantes se han realizado con átomos⁵ y moléculas.⁶ Para partículas con una temperatura dada T , la longitud de onda de de Broglie térmica se define como $\lambda_{dB T} = h/(2\pi mkT)^{1/2}$ donde m es la masa de la partícula, h la constante de Planck y k la constante de Boltzman. A temperatura ambiente, $\lambda_{dB T}$ para un gas de electrones es aproximadamente 6.5 nanómetros. Es decir, la longitud de onda típica en experimentos interferométricos para electrones es dos órdenes de magnitud menor que la relevante en interferometría óptica.

La interferometría tiene vastas aplicaciones que incluyen entre otras áreas la metrología y la imaginología. En ambos casos, la resolución esta limitada, entre otras causas, por la longitud de onda de la fuente utilizada, la coherencia de las ondas involucradas y, en ocasiones extremas, por efectos plenamente cuánticos como las relaciones de incertidumbre de Heisenberg. En este contexto, no es sorprendente el gran interés en el estudio y generación de estados cuánticos de luz alternativos que esquiven estas limitantes. Similarmente, se hace importante crear fuentes de partículas materiales con un gran índice de coherencia cuántica que permitan realizar interferometría a longitudes de onda mucho menores a las utilizadas en dispositivos ópticos. En esta monografía nos enfocaremos al uso de átomos para este fin. Cabe resaltar que electrones y neutrones también han sido utilizados.^{7,8}

Un láser atómico es un dispositivo cuya salida es un haz coherente de átomos, de tal suerte que al interferir con otro haz atómico coherente se genera un patrón de interferencia cuántico.

Para el lector que conoce los lineamientos generales que se emplean en la generación de luz láser, cabe resaltar que existe un análogo entre los elementos básicos de un láser lumínico y un láser atómico. En el diseño original,⁹ la cavidad resonante tiene como análogo una trampa magnética, el medio activo equivale a una nube atómica térmica y el acoplamiento al exterior se logra mediante un pulso de radiofrecuencia que controla la reflectividad de espejos magnéticos.

El mecanismo básico detrás de la generación de luz láser es la emisión estimulada de fotones cuyos campos eléctricos tienen una dependencia espacio-temporal similar. Los fotones son emitidos por átomos que constantemente son llevados a un nivel atómico excitado preseleccionado. En el caso de láseres atómicos, los átomos del haz coherente se encontrarán esencialmente descritos por una función de onda colectiva basada en un único modo.

La clave para la producción de láseres atómicos es la posibilidad actual de generar los llamados condensados de Bose-Einstein (BEC) para gases atómicos diluidos. La condensación de Bose-Einstein fue predicha en 1924 para un gas ideal de partículas indistinguibles cuya estadística no limita el número de partículas que ocupan un estado cualquiera (bosones). Es una transición de fase que requiere bajas temperaturas y altas densidades. En la fase BEC existe un porcentaje significativo de partículas ocupando el estado de energía más bajo. A diferencia de los gases ideales de Bose y Einstein, los condensados formados en laboratorio involucran átomos o moléculas que colisionan entre sí y están confinados por trampas electromagnéticas. Estas colisiones son de hecho muy importantes en la generación de un láser atómico. En condiciones adecuadas, cuando un par de átomos bosónicos de un gas colisionan elásticamente, la probabilidad de

que alguno de ellos sea dispersado en un estado cuántico dado es proporcional a la ocupación existente de ese estado. Este proceso se denomina dispersión estimulada y es el análogo directo a la emisión estimulada empleada en láseres lumínicos.

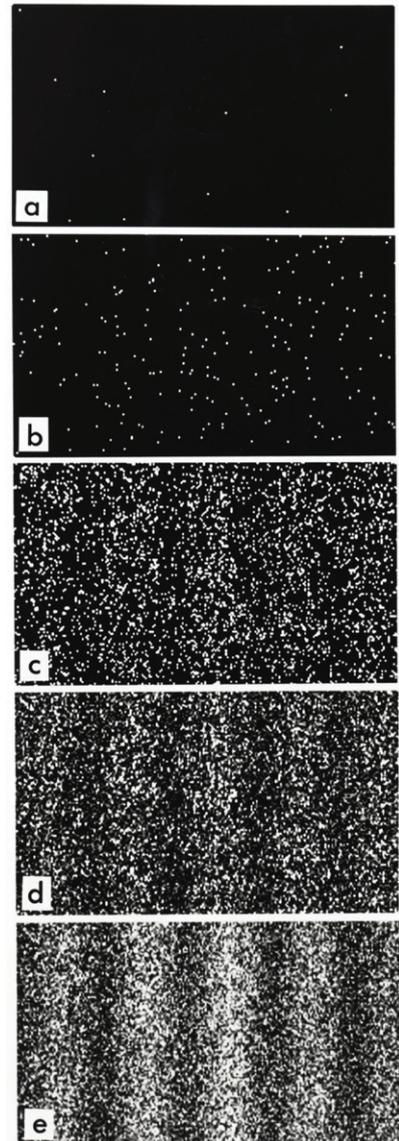


Figura 2. Experimento de Young para fuentes en las que, en promedio, una partícula que requiere una descripción cuántica es emitida en un tiempo mayor o igual al requerido clásicamente para que transite por el dispositivo. La imágenes son fotografías a diferentes tiempos de la pantalla de detección y corresponden al experimento de Tanomura et al que involucra electrones.⁴

En fase de condensación, la nube térmica de átomos que rodea al condensado es el medio del cual podrá nutrirse este, aumentando el número de átomos en el estado base mediante la dispersión estimulada.

Para extraer un haz coherente del gas atómico, hay que tomar en cuenta que usualmente el BEC se genera en una trampa magnética u óptica y que, en ambos casos, el potencial de confinamiento es dependiente del estado interno de los átomos. Por ello, el modificar adecuadamente este estado interno permite extraer átomos de la trampa. En particular, en el experimento original del grupo liderado por W. Ketterle, se utilizaron pulsos de ondas electromagnéticas en la región de radiofrecuencia capaces de modificar el estado interno y generar un haz atómico coherente y pulsado. Posteriormente se idearon otros mecanismos que han permitido entre otras cosas, obtener haces atómicos coherentes y continuos¹⁰.

La demostración más directa de la coherencia de un haz de partículas materiales es con un experimento interferométrico. En la Figura 3 se reproduce el patrón de difracción que obtuvo Ketterle para un condensado de átomos de sodio. En el arreglo experimental se generaron BECs en dos regiones diferentes de una trampa magnética. Al apagar ésta, las nubes atómicas caen por efecto de la gravedad y se expanden debido al momento remanente de los átomos. Las nubes atómicas se superponen en un momento dado y se genera el patrón de interferencia mostrado en la Figura 3. Esto muestra de manera contundente la interferencia entre las nubes atómicas, validándose así la coherencia de los haces.

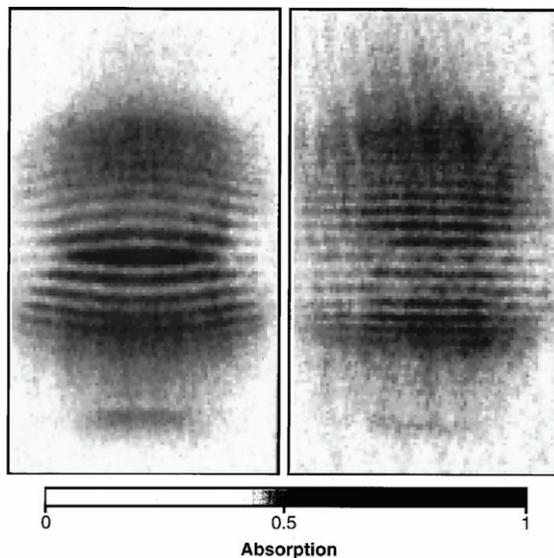


Figura 3. Patrón de interferencia de haces coherentes constituidos por átomos de sodio. (Figura tomada de la referencia 11).

Es importante resaltar algunas de las diferencias básicas entre la luz que emana de un láser atómico y un láser lumínico. Debido a que los átomos interactúan entre sí, mientras se propaga, el haz de salida se deforma y pierde coherencia cuántica en distancias mucho más cortas que la luz láser. Un medio como el aire a temperatura ambiente destruye al condensado rápidamente. Además, siendo partículas masivas, los átomos se ven altamente influenciados por la gravedad. La manipulación de haces coherentes atómicos requiere de la construcción de divisores de haz, espejos y demás componentes análogos a los ópticos. Su diseño debe tomar en cuenta las diferencias entre fotones y átomos ya mencionadas. En muchas ocasiones, los dispositivos para manipular los haces atómicos son de origen óptico. Por ejemplo, pulsos de luz láser pueden ser utilizados como divisores de haces atómicos.

Desde el punto de vista de la ciencia básica, la descripción precisa de la interferencia de haces atómicos conlleva el entendimiento claro de efectos cuánticos de muchos cuerpos y los mecanismos de pérdida de coherencia cuántica por interacción con el entorno.

Desde el punto de vista tecnológico, la interferometría atómica ya ha brindado resultados importantes, además las perspectivas son muy prometedoras. Un ejemplo son los acelerómetros basados en interferometría atómica; con ellos se ha medido en forma absoluta la fuerza de gravedad con una precisión record respecto a cualquier otro método de $1.3 \times 10^{-9} g$ ¹² y la rotación terrestre con una precisión de $6 \times 10^{-10} \text{ rad/seg/Hz}^{1/2}$.¹³ Recordemos que mediciones precisas de aceleraciones son útiles no sólo en metrología sino en áreas diversas como la geofísica, ingeniería

prospectiva y navegación inercial. A nivel de física básica, tales límites de precisión ya han permitido explorar aspectos de física fundamental; por ejemplo, se han realizado pruebas de invariancia local de Lorentz,¹⁴ y pruebas del principio de equivalencia¹⁵. En el último año, mediciones que buscan detectar corrimientos hacia el rojo por efectos gravitacionales de relatividad general son objeto de álgidas discusiones acerca de las expectativas teóricas y la interpretación de resultados.¹⁶

A futuro se plantea como una opción efectuar experimentos en naves espaciales y quizá detectar ondas gravitacionales¹⁷. El área es joven, y mucho trabajo resta por hacer respecto a la generación, entendimiento y uso de estados coherentes de ondas cuánticas de materia.

Bibliografía

- 1.- G. I. Taylor, "Interference Fringes with Feeble Light", *Proc. Cam. Phil. Soc.* 15, 114 (1909).
- 2.- P. Grangier, G. Roger y A. Aspect, "Experimental Evidence for a Photon Anticorrelation Effect on a Beam Splitter: A New Light on Single-Photon Interferences", *Europhysics Letters* 1, 173 (1986).
- 3.- C. Jönsson, *Zeitschrift für Physik*, 161:454 (1961); C Jönsson, "Electron diffraction at multiple slits", *American Journal of Physics* 42, 4 (1974).
- 4.- A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki y H. Ezawa, "Demonstration of single-electron build-up of an interference pattern", *American Journal of Physics* 57, 117 (1989). Así como la página web <http://physicsworld.com/cws/article/indepth/9745>
- 5.- O. Carnal y J. Mlynek, "Young's double-slit experiment with atoms: a simple atom interferometer", *Physical Review Letters* 66, 2689 (1991).
- 6.- M. Arndt, O. Nairz, J. Vos-Andreae, C. Keller, G. van der Zouw y A Zeilinger, "Wave-particle duality of C60 molecules", *Nature* 401, 680 (1999).
- 7.- J. C. H. Spence, "Electron interferometry", *Compendium of Quantum Physics* 188 (2009).
- 8.- H. Rauch, "Neutron interferometry", *Compendium of Quantum Physics* 402 (2009).
- 9.- M. O. Mewes, M. R. Andrews, D. M. Kurn, D. S. Durfee, C. G. Townsend y W. Ketterle, "Output coupler for Bose-Einstein condensed atoms", *Physical Review Letters* 78, 582 (1997).
- 10.- I. Bloch, T.W. Haensch, and T. Esslinger, "Atom laser with a cw coupler", *Physical Review Letters* 82, 3008 (1999).
- 11.- M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn y W. Ketterle, "Observation of Interference Between Two Bose Condensates", *Science* 275, 637-641 (1997).
- 12.- B. Dubetsky y M. A. Kasevich, "Atom interferometer as a selective sensor of rotation or gravity", *Physical Review A* 74, 023615 (2006).
- 13.- T.L. Gustavson, A. Landragin y M.A. Kasevich, *Classical Quantum Gravity* 17, 2385 (2000).
- 14.- K. Y. Chung, S. W. Chiow, S. Chu y H. Muller, "Atom interferometry tests of local Lorentz invariance in gravity and electrodynamics", *Physical Review D* 80, 016002 (2009).
- 15.- S. Fray, C. A. Alvarez Diez, T. W. Hansch y M. Weitz, "Atomic interferometer with amplitude gratings of light and its applications to atom based tests of the equivalence principle", *Physical Review Letters* 93, 240404 (2004).
- 16.- H. Müller, A Peters y S. Chu, "A precision measurement of the gravitational redshift by the interference of matter waves", *Nature* 463, 926 (2010); P. Wolf, L. Blanchet, C. J. Borde, S. Reynaud, C. Salomon y C. Cohen-Tannoudji, "Atom gravimeters and gravitational redshift", *Nature* 467, 934 (2010); H. Müller, A Peters y S. Chu, reply, *Nature* 467, 7311 (2010).
- 17.- F. Sorrentino et al "A compact atom interferometer for future space missions", *Microgravity Science and Technology* 22, 551 (2010).

Para dar un panorama de la gran variedad de aplicaciones de estas fuentes de luz basta ver el cuadro de la Figura 3. En él se presentan en forma matricial el tipo de aplicaciones estándar de una fuente de luz de tercera generación. En las columnas se presentan las áreas de la ciencia involucradas mientras que los renglones clasifican las técnicas utilizadas.

Existen dos grandes tipos de sincrotrones de tercera generación. La diferencia entre ambos es que unos se especializan en rayos X duros (12.4 keV), éstos típicamente contestan la pregunta ¿dónde están los átomos? El segundo tipo de sincrotrón está diseñado para producir rayos X blandos (de unos keV) y responde a la pregunta ¿qué hacen los electrones en los átomos? las energías relevantes de los fotones involucrados están controlados por la fórmula de Planck

$$E(\text{fotón}) = \frac{hc}{\lambda_\gamma} \approx 12.4 \text{ keV}$$

en el caso de los rayos X duros. En cambio, para los rayos X blandos la energía relevante es la de excitación de los electrones

$$E(\text{electrón}) = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_{el}^2} \approx 150 \text{ eV}$$

ambas estimaciones están hechas con la longitud de onda correspondiente $\lambda \approx 1 \text{ \AA}$

Hasta aquí se da la discusión de los aspectos técnicos generales de la luz de sincrotrón. La idea que se intenta transmitir es que este tipo de instalaciones tienen en primer lugar múltiples usos y que aunque llevan varios decenios trabajando difícilmente han agotado su capacidad de descubrimiento. En cierta forma son como los microscopios o los telescopios, que si bien se renuevan y mejoran constantemente tienen una variedad de aplicaciones tales que garantizan su utilidad por mucho tiempo. Esto distingue a estas “facilidades” de los aceleradores dedicados a la exploración de la física de altas energías cuya especialización las enfoca y después de algunos años hay que rehacer el acelerador mismo o bien cerrarlo tal como ocurrió en los últimos años con DESY, LEP en CERN, SLAC y apenas hace unas semanas con el Tevatrón de Fermilab.

Veamos ahora aspectos de las fuentes de luz sincrotrón que surgen de manera recurrente más allá de su sentido y uso científico, tecnológico e industrial. Una de las primeras dudas que surgen es

¿Cuál es el costo de una fuente de luz ?

Aunque los costos dependen de las características específicas del acelerador y del lugar en que se instala una buena estimación obtenida de los costos de los aceleradores recientes es entre 250 y 400 millones

de dólares (M\$). Estos son principalmente invertidos a lo largo del período de construcción. De nuevo, el período de construcción es de 5 a 8 años. Una vez construido la operación, mantenimiento y actualización de la instalación requieren de unos M\$ 5 a M\$ 20 por año.

Varios comentarios son necesarios para apreciar los datos anteriores. Primero, no ha habido un laboratorio científico de esta magnitud en nuestro país, al menos no uno con impacto en las ciencias duras. El proyecto más caro comparable es el Gran Telescopio Milimétrico, el costo de este último es de aproximadamente la tercera parte de la estimación hecha arriba. Segundo, el costo parece enorme cuando uno lo ve por primera vez, para tenerlo en una mejor perspectiva hay que compararlo con el gasto corriente de un buen instituto de ciencias, En el período de construcción suponiendo M\$ 360 en 6 años tenemos una inversión anual promedio de cerca de M\$ 60 lo que equivale al gasto corriente de dos o tres institutos de investigación. Tercero, la estimación aquí presentada está basada en los datos presentados por los laboratorios recientemente puestos en marcha: Diamond, Soleil y Alba; es indispensable hacer un proyecto detallado para nuestro país si se quiere tener un costo más preciso y poder especificar qué parte de la inversión se hará en el país y que se debería adquirir fuera.

¿Quién usaría esta fuente ?

Estamos realizando un censo de usuarios mexicanos de estas fuentes de luz. Para tener una idea de cuántos usuarios hay podemos tomar como base los participantes en el primer taller de física de aceleradores que se llevó a cabo en 2007. Ahí se tuvo una participación de cerca de 40 investigadores, 30 de los cuáles eran usuarios. Mi estimación es que en aquel entonces asistieron la mitad de los

que usan periódicamente las fuentes de luz. En la experiencia de otros países los usuarios potenciales son al menos un factor de tres a cinco cuando se inicia la construcción y al terminarla el número de usuarios crece al doble, estaríamos hablando de unos 200 a 500 usuarios en 8 años. Dados los tiempos de planeación y desarrollo de una instalación de este tipo se debería emprender en paralelo un programa de información sobre las posibilidades que una fuente de luz traería para las comunidades científica, tecnológica e industrial.

¿ Hay quién pueda operar y planear un laboratorio así en México ?

Aunque hay varios aceleradores activos en nuestro país éstos son de una tecnología distinta de la de un sincrotrón. La experiencia en estos laboratorios muestra que -estos se usan y se usan bien. Una parte importante de la infraestructura y experiencia de estos aceleradores se podría usar para realizar prototipos en la fase de planeación y en la ejecución del proyecto.

Un aspecto que de hecho es parte de la motivación de los entusiastas de un laboratorio de luz sincrotrón es el desarrollar un área de la ciencia muy poco desarrollada en nuestro país: La física de aceleradores. De nuevo el uso de aceleradores en nuestro país ha sido hasta el momento principalmente en aceleradores electrostáticos. Una fuente de luz requiere del concurso de varias decenas de científicos, ingenieros y técnicos que se formarían en temas en los que no tenemos una base consolidada.

Hay en la física y la ciencia de aceleradores un desarrollo vertiginoso en los años recientes. Éste va desde la confirmación de que es posible alcanzar gradientes de aceleración de GeV por metro (20 veces mayor al que se tiene en un acelerador como el propuesto para la fuente de luz), hasta el uso de aceleradores para producir energía nuclear de manera intrínsecamente segura y minimizando hasta hacerlos irrelevantes los residuos radiactivos peligrosos. El futuro de esta área de la física ya llegó. Finalmente algunos de los países que hoy operan exitosamente fuentes de luz sincrotrón tenían condiciones de inicio mucho peores.

¿No resultaría más barato enviar a los interesados a hacer sus experimentos al extranjero ?

Esta es una cuenta cuyo resultado es positivo o negativo dependiendo de lo que uno incluya o excluya. Si sólo tomamos en cuenta los boletos y viáticos de los científicos que irían a hacer sus experimentos y mediciones es posible que sea más barato el no hacer una fuente en México en el futuro cercano (¿diez o veinte años ?). La respuesta se vuelve menos fácil si pensamos en que en la sociedad del conocimiento el saber hacer es parte de las posibilidades de crecimiento y de competitividad de un país. La ausencia de conocimiento en un

área de la ciencia y de la tecnología implica falta de visión y de capacidad de tomar decisiones correctas. Quizás no deberíamos preguntarnos cuánto nos costará una fuente de luz sino cuánto nos cuesta no tenerla ya.

En este punto pienso que esta instalación la vemos hoy en día como una persona educada vería en el siglo XIX la adquisición de un microscopio. Uno no sabe lo que se pierde hasta que no observa en el aparato y después uno necesita más y mejores aparatos de esa clase. Sólo quiero referir aquí una plática que tuve con el Dr. Joan Bordas, el actual director de la fuente de luz española. Él me decía que se estima que un país debe tener una fuente de luz por cada 20 millones de habitantes; ¿ si no se equivoca deberíamos tener cinco o seis fuentes de luz !

El uso de una instalación de este tipo claramente depende de la madurez y las necesidades científico-tecnológicas e industriales de un país. En ese sentido la respuesta a la pregunta con la que este trabajo comienza se puede hacer más precisa preguntándonos a su vez no tanto si México debe tener una instalación de este tipo sino cuándo la tendrá.

Los grandes proyectos científicos tienen la virtud de concentrar los esfuerzos de un sector de la comunidad científica en un conjunto de temas coherentes. Esta coherencia no se da de manera sencilla fuera de los grandes proyectos pues sin ellos la tendencia natural en los investigadores es buscar un tema de trabajo que los diferencie de sus colegas. Esto último no es en sí algo negativo, pues esta conducta permite a una comunidad científica abarcar una gran variedad de temas. Sin embargo, la falta de coherencia lleva al sistema científico a ser poco eficiente y a tener logros más bien individuales. La riqueza intelectual que implica abarcar una gran variedad de temas hace poco efectivo el avance científico.

Desde un punto de vista estratégico la función principal que una planeación científica conlleva es la de buscar el grado en que los grandes proyectos no aniquilen la riqueza intelectual de la propia comunidad. En este sentido, estos proyectos deben más bien seducir a la comunidad antes que ser impuestos a ella. Sólo una situación crítica orilla a un investigador formado a abandonar los proyectos que él mismo se ha forjado para introducirse en un proyecto de carácter colectivo.

La piedra de toque es encontrar un equilibrio entre los proyectos individuales y los colectivos.

Hasta ahora el sistema científico mexicano se ha desarrollado naturalmente promoviendo el desarrollo científico individual. Hay muy buenas razones para que esto haya ocurrido así. Varios factores han contribuido a ello, primero el tamaño mismo de la comunidad científica ha limitado la posibilidad de tener grandes proyectos, puesto en otros términos, el gran proyecto fue desarrollar la propia comunidad. Segundo, hasta hace relativamente poco tiempo el desarrollo económico del país ha tenido un modelo en el que la innovación científica y tecnológica tuvo un papel, si acaso, más bien marginal. Tercero, por lo anterior los grupos científicos se han concentrado entorno a los centros de enseñanza superior y a las universidades.

Es claro que algunos centros de investigación promovidos por CONACYT o Institutos Nacionales como el Mexicano del Petróleo o el Nacional de Investigaciones Nucleares han sido concebidos con un espíritu diferente del arriba mencionado. Pero también es cierto que el grueso de la comunidad científica no está tan siquiera conectada

profesionalmente a estos quehaceres. Es el momento de plantearnos la conveniencia de un desarrollo científico y tecnológico de mayor envergadura. Las condiciones para tal desarrollo parecen estar dadas tanto por el tamaño y la madurez de la comunidad científica y tecnológica como por la necesidad de construir una nueva relación entre los académicos y el sector productivo.

Agradezco al Dr. Guillermo Monsivais por invitarme a realizar este artículo para una nueva etapa del Gluón, al Ing. Rodolfo Leo la lectura crítica de este manuscrito y su ayuda con las figuras del mismo. A mis colegas los Dres. Armando Antillón, Guillermo Contreras, Gerardo Herrera y Mauro Napsuciale por un buen número de discusiones sobre temas de este trabajo que me han ayudado a esclarecer y corregir mis ideas. Finalmente a los Dres. Jorge Flores, Tomás Viveros y José Antonio de la Peña por el entusiasmo compartido por hacer avanzar la ciencia de nuestro país. Este trabajo fue realizado con el apoyo del proyecto Conacyt 82291.

LA IMPORTANCIA DE LA SUPERFICIE

Muchas reacciones químicas importantes se producen sobre superficies sólidas. El resultado puede que esté a la vista, como es el caso de la oxidación de una simple barra de hierro, o ser más sutil como la transformación de los gases de escape de los automóviles que tiene lugar en los convertidores catalíticos. ¿Cómo ocurren estas reacciones?

En 2007 el Premio Nobel de Química fue otorgado a Gerhard Ertl, del Instituto Fritz Haber de Berlín, más que por un descubrimiento en particular, por su contribución al estudio de los procesos químicos sobre superficies sólidas¹.

La química de superficies moderna comenzó a surgir en los años 1960 gracias al desarrollo de las técnicas de ultra alto vacío (UHV) utilizadas en la industria de los semiconductores. Ertl fue uno de los científicos en visualizar el potencial de la nueva tecnología para el estudio de procesos catalíticos en superficies.

Una reacción química involucra la ruptura y formación de nuevos enlaces entre átomos. La función del catalizador es proveer un camino alternativo a la reacción, con una energía de activación más baja, a través del cual la reacción química puede ocurrir permitiendo la formación de los productos deseados con una rapidez comercialmente viable. Los catalizadores se utilizan en alrededor del 90% de los procesos químicos en el mundo y son importantes para el control de la contaminación ambiental. Muchos tipos de materiales pueden servir como catalizadores, entre ellos, metales, óxidos, y sulfuros. Los catalizadores que presentan interés científico e industrial, son sólidos porosos de gran área específica en cuya superficie se encuentra disperso un componente catalíticamente activo en la forma de nanocristales. A este tipo particular de catalizador se le denomina catalizador soportado. Estos son los catalizadores “reales” y las condiciones en las que operan incluyen altas presiones y altas temperaturas.

En las reacciones catalíticas heterogéneas la interacción de las moléculas con la superficie del catalizador es primordial. Cuando una molécula choca con una superficie sólida puede quedar retenida (adsorción). La adsorción puede ser disociativa o molecular. Una vez adsorbida, la molécula puede moverse de un lugar en la superficie a otro (difusión superficial), o abandonarla (desorción). La interacción entre la superficie y la molécula adsorbida puede ocasionar la disociación de la molécula, es decir, la ruptura de sus enlaces químicos, con la consiguiente generación de fragmentos moleculares que, a su vez, pueden difundir hasta entrar en colisión con otras especies superficiales, con las que pueden reaccionar, formar nuevos enlaces y generar nuevas moléculas².

Así, Ertl, en vez de utilizar catalizadores “reales” cuyas propiedades pueden ser difíciles de controlar dadas sus características, estudió sistemas modelo usando monocristales. En condiciones de UHV era posible mantener la superficie libre de contaminación por un tiempo razonable y examinarla con técnicas comunes a la física. Durante muchos años centró su actividad en el desarrollo y perfeccionamiento de nuevas herramientas experimentales, integrando un grupo de trabajo multidisciplinario, para el estudio de la interacción de moléculas con superficies sólidas, paso indispensable para lograr su objetivo: el entendimiento de los mecanismos atómicos y moleculares que intervienen en una reacción catalítica heterogénea. El enlace de moléculas con la superficie, la posición en energía de sus orbitales moleculares y la modificación de éstos producida por la interacción con la superficie, así como la determinación del estado disociado o no de las moléculas al adsorberse eran cuestiones abordadas sistemáticamente en el grupo de Ertl.

Uno de sus trabajos más importantes fue el estudio del mecanismo de la síntesis de amoníaco a partir de sus elementos, $N_2 + 3H_2 \rightarrow 2NH_3$ (Proceso Haber-Bosch). El catalizador industrial consiste de una mezcla de hierro, abundante y barato, y óxidos de aluminio, de calcio y de potasio. A pesar de la relevancia tecnológica de la reacción, al inicio de los años 1970 no se entendía con precisión como ésta se desarrollaba en la superficie del hierro. ¿Cuál era la especie reactiva, nitrógeno molecular o nitrógeno atómico? ¿Cuál era el paso limitante (más lento) del proceso? Con el fin de mejorar un proceso en su conjunto, es necesario lograr que el paso más lento transcurra con mayor facilidad (más rápido).

Ertl y su grupo estudiaron la interacción de nitrógeno e hidrógeno en superficies monocristalinas de hierro, Fe(111) y Fe(100). El arreglo cristalográfico que caracteriza a los planos (111) y (100) se obtiene cortando un cristal de hierro perpendicularmente a las direcciones [111] y [100], respectivamente. Utilizaron técnicas como la Espectroscopía de Electrones Auger (AES), la Difracción de Electrones de Baja Energía (LEED), la Espectroscopía de Fotoelectrones producidos por radiación UV (UPS), entre otras, para identificar a los átomos y moléculas adsorbidos en la superficie de los monocristales. También depositaron, de manera controlada en la superficie, átomos de potasio para estudiar el efecto de este promotor presente en el catalizador industrial. Demostraron para esta reacción reversible, que la molécula de N_2 se disocia en la superficie del hierro una vez que se adsorbe; que los átomos de hidrógeno adsorbidos resultantes de la adsorción disociativa de H_2 reaccionan con un átomo de nitrógeno adsorbido, de uno en uno, hasta formar la molécula de amoníaco, NH_3 . La disociación de la molécula de nitrógeno adsorbida es el paso lento del proceso. La función de los átomos de potasio era la de facilitar la ruptura del fuerte enlace N-N en la molécula adsorbida. También fue posible determinar las energías involucradas en cada paso de la reacción.

La oxidación de CO en superficies metálicas es un ejemplo de una reacción que presenta fenómenos no-lineales de auto-organización. Uno de los mecanismos de reacción propuestos es el siguiente: el CO adsorbido en la superficie del catalizador interacciona con un átomo de oxígeno adsorbido proveniente de la adsorción disociativa de la molécula de O_2 , para formar una molécula de CO_2 la cual se desorbe rápidamente. Se había observado en catalizadores de Pt soportado, que la cantidad de CO_2 producido oscilaba con el tiempo. Para entender el mecanismo molecular detrás de la cinética no-lineal observada, Ertl estudió la reacción utilizando superficies monocristalinas de platino, entre ellas, Pt(110). Usando la técnica LEED, encontró que la clave del comportamiento oscilante era la reconstrucción de la superficie en presencia de las moléculas de CO y O_2 .

Un plano puede o no presentar reconstrucción superficial. Cuando no hay reconstrucción, por ejemplo, una superficie Pt(110) conserva el ordenamiento atómico del plano (110) como en el bulto, y se identifica con la notación Pt(110)-(1x1). Ahora bien, una superficie Pt(110) limpia (en UHV), se reconstruye a un arreglo atómico con una hilera de átomos faltante, cuya notación es Pt(110)-(1x2). Las propiedades de estas dos estructuras superficiales, (110)-(1x1) y (110)-(1x2) con relación a la adsorción de CO y O_2 son diferentes. El calor de adsorción del CO en la superficie (110)-(1x1) es mayor que en la superficie (110)-(1x2). En consecuencia, si el CO se adsorbe en una superficie Pt(110)-(1x2) limpia, cuando la concentración del CO adsorbido exceda un valor crítico, la estructura de la superficie regresará al arreglo atómico (110)-(1x1). Por otra parte, la adsorción disociativa de O_2 es más favorable en superficies con una estructura (110)-(1x1).

Tomando esto en consideración, la aparición de oscilaciones temporales (máximos y mínimos) en la producción de CO_2 , Figura 1a, fue explicada de la siguiente manera: si una superficie Pt(110)-(1x2) limpia, es expuesta a una mezcla apropiada de $CO+O_2$, la adsorción de CO provocará una re-estructuración local (110)-(1x2) \rightarrow (110)-(1x1). Esta reconstrucción superficial incrementa la cantidad de átomos de oxígeno adsorbidos y consecuentemente la producción de CO_2 . A medida que el CO se convierte en CO_2 , su concentración en superficie eventualmente cae provocando que la superficie regrese a su estructura original por una reconstrucción (110)-(1x1) \rightarrow (110)-(1x2), lo que inicia un nuevo ciclo. El modelo teórico del fenómeno corroboró el resultado experimental.

Esta explicación sugería que ciertas regiones de la superficie podrían estar recubiertas mayoritariamente con CO mientras que otras lo estarían con oxígeno. Para confirmar esto, Ertl y colaboradores usaron un microscopio electrónico de fotoemisión (PEEM) para observar la superficie de platino durante la reacción. La distribución de la concentración de las especies adsorbidas en la superficie daba lugar a patrones espacio-temporales que incluían, entre otros, ondas estacionarias y propagantes, espirales, estructuras irregulares y caos. Una reacción aparentemente muy simple entre dos moléculas diatómicas en la superficie de un monocristal, cuyo mecanismo era bien conocido y con todos los parámetros externos controlados, exhibía en realidad un comportamiento complejo. La modificación de los patrones observados podía lograrse desde el exterior manipulando alguno de los parámetros de control, sea local o globalmente como se mostró en el 2001, Figura 1b. (En el sitio www.fhi-berlin.mpg.de/surfmag/arts.htm se presenta un video musicalizado del fenómeno; "On Platinum" for Gerhard Ertl.)

El trabajo de Ertl y su grupo ha contribuido de manera fundamental para la comprensión de muchos fenómenos de superficie a partir del estudio de sistemas modelo usando monocristales de metales y aleaciones en UHV. Con ello, el impacto de la ciencia de superficies en la catálisis y otros campos ha sido innegable. En la actualidad, además de monocristales, los sistemas modelo bajo estudio incluyen nanopartículas depositadas sobre películas delgadas o monocristales utilizando técnicas altamente sofisticadas, Figura 2. Estos sistemas modelo se acercan un poco más a los catalizadores soportados reales, y permiten estudiar aspectos como la influencia del tamaño de partícula, de la morfología y la interacción con el soporte, entre otros. Las técnicas disponibles para estudiar las propiedades estructurales, electrónicas, vibracionales y dinámicas de sistemas modelo, superficies y nanopartículas, es muy amplia^{3,4}. Las espectroscopías laser ultra-rápidas⁵ han aportado mucho

al estudio de la dinámica vibracional de especies adsorbidas. El interés por cerrar la brecha entre la catálisis que se lleva a cabo en condiciones de alta presión y la ciencia de superficies ha estimulado el desarrollo de técnicas con una alta especificidad y sensibilidad que puedan operar en condiciones no restringidas al vacío. En la Figura 3 se puede observar un esquema que muestra como algunas de ellas son utilizadas para estudios en condiciones de alta presión.

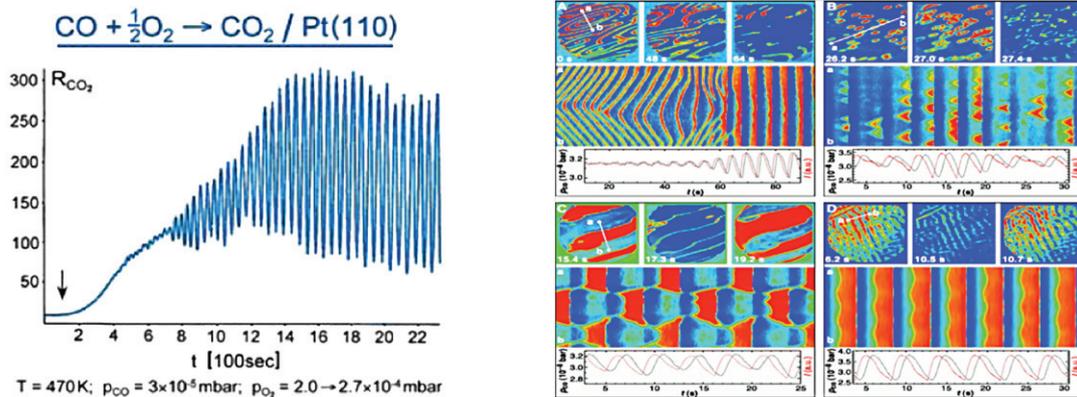


Figura 1. Oxidación de CO sobre Pt(110).

a) Umbral de inicio de oscilaciones en la producción de CO_2 (Figura tomada de la referencia 6).

b) Modificación de patrones espacio-temporales usando la presión parcial de CO como variable de control (La figura está tomada de la referencia 7).

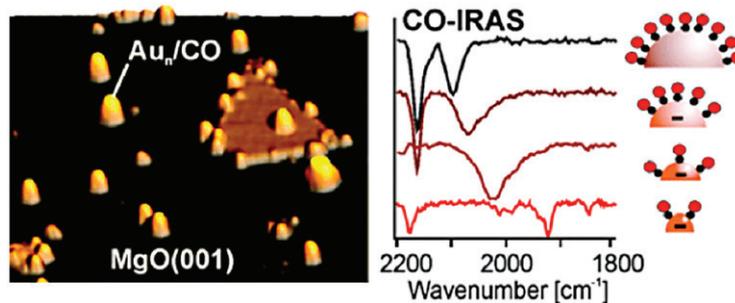


Figura 2. Adsorción de CO en nanopartículas de Au depositadas sobre películas de MgO(001). Caracterización por STM e IRAS. (Figura tomada de la referencia 8).

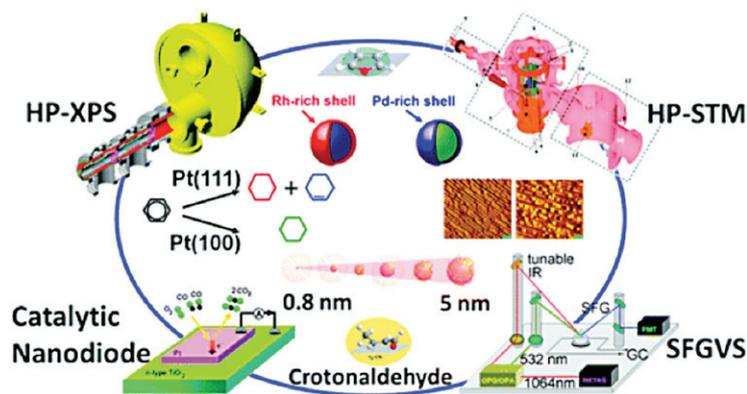


Figura 3. Técnicas de caracterización utilizadas para analizar catalizadores bajo condiciones de alta presión. (La figura está tomada de la referencia 4).

Referencias.

- 1.- G. Ertl, "Reactions at Surfaces: From Atoms to Complexity (Nobel Lecture)", *Angew. Chem. Int. Ed.* 47, 3524 (2008).
- 2.- a) G. Ertl, "Reactions at Solid Surfaces", John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, 2009.
b) G. A. Somorjai and Y. Li, "Introduction to Surface Chemistry and Catalysis", John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, 2010.
- 3.- H.-J. Freund, "Model Studies in Heterogeneous Catalysis", *Chem. Eur. J.* 16, 9384 (2010).
- 4.- Gabor A. Somorjai and Cesar Aliaga. "Molecular Studies of Model Surfaces of Metals from Single Crystals to Nanoparticles under Catalytic Reaction Conditions." *Langmuir* 26(21), 16190(2010).
- 5.- Heike Arnolds, "Vibrational dynamics of adsorbates – Quo vadis?" *Progress Reports. Progress in Surface Science*, doi:10.1016/j.progsurf.2010.10.001
- 6.- M. Eiswirth, G. Ertl, "Kinetic oscillations in the catalytic CO oxidation on a Pt(110) surface", *Surf. Sci.* 177 (1), 90 (1986).
- 7.- Minseok Kim, et al, "Controlling Chemical Turbulence by Global Delayed Feedback: Pattern Formation in Catalytic CO Oxidation on Pt(110)", *Science* 292 (5520), 1357-1360 (2001).
- 8.- Xiao Lin, et al, "Charge-Mediated Adsorption Behavior of CO on MgO-Supported Au Clusters", *J. Am. Chem. Soc.*, 132 (22), 7745-7749 (2010).

