ACADEMIA DE CIENCIAS DE LA REGIÓN DE MURCIA

La naturaleza dual de la materia: interferencias moleculares

Discurso del Académico de Número

Ilmo. Sr. D. Alberto Requena Rodríguez

leído en la Sesión Solemne de Apertura de Curso

Febrero de 2009

ACADEMIA DE CIENCIAS
DE LA
REGIÓN DE MURCIA

LA NATURALEZA DUAL DE LA MATERIA: INTERFERENCIAS MOLECULARES

Discurso del Académico de Número
Ilmo. Sr. D. Alberto Requena Rodríguez
leído en la Sesión Solemne de Apertura de Curso
Febrero de 2009

Murcia
2009

LA NATURALEZA DUAL DE LA MATERIA: INTERFERENCIAS MOLECULARES

Todos los derechos reservados

Queda prohibida, salvo excepción prevista en la Ley, cualquier forma de reproducción, distribución, comunicación pública y transformación de esta obra sin contar con autorización del titular de propiedad intelectual. La infracción de los derechos mencionados puede ser constitutiva de delito contra la propiedad intelectual (arts. 270 y ss. del Código Penal).

© Academia de Ciencias de la Región de Murcia, 2008

I.S.B.N.: 978-84-612-6538-1

D.L.: MU-2214-2008

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN 1

CUANTOS 9

DIFRACCIÓN E INTERFERENCIA 11

COHERENCIA 15

SUPERPOSICIÓN DE ESTADOS COHERENTES 20

ESTADOS ENTRELAZADOS 33

INTERFERENCIAS DE FOTONES ÚNICOS 39

INTERFEROMETRÍA ATÓMICA 41

INTERFEROMETRÍA MOLECULAR 44

INTERFERENCIA Y ESTRUCTURA MOLECULARES 53

INTERFERENCIA CUÁNTICA CON GRANDES MOLÉCULAS 55

INTERFERENCIA Y COHERENCIA 60

INFORMACIÓN SOBRE EL RECORRIDO 64

AGOTAMIENTO DE HACES MOLECULARES POR CAMPOS ELÉCTRICOS HOMOGÉNEOS Y OSCILANTES. 65

INTERACCIÓN DE UN HAZ DE MOLECULAS POLARES CON CAMPOS ESTÁTICO Y DE RADIOFRECUENCIAS OSCILANTE, COMO FUENTE DE INTERFERENCIAS MOLECULARES 72

RESONANCIA EN LA INTERACCIÓN DE UN HAZ DE MOLÉCULAS POLARES CON CAMPOS SIMULTÁNEOS ESTÁTICO Y DE RADIOFRECUENCIAS OSCILANTE 75

INTENSIDAD DE LA SEÑAL EN LA INTERACCIÓN DE UN HAZ DE MOLÉCULAS POLARES CON CAMPOS SIMULTÁNEOS ESTÁTICO Y DE RADIOFRECUENCIAS OSCILANTE 76

INTENSIDAD DE LA SEÑAL DE UN HAZ SUPERSÓNICO SOMETIDO A CAMPOS ESTÁTICO Y OSCILANTE, EN CONDICIONES DE RESONANCIA 78

INTERFERENCIAS MOLECULARES EN HACES DE NO 84

NOTAS FINALES 85

AGRADECIMIENTOS 87

BIBLIOGRAFÍA 89

La interpretación de los fenómenos naturales exige una descripción y comprensión en términos de la Mecánica Cuántica [1, 2]. Es bien conocido que a escala atómica y molecular y a escala subatómica y submolecular, no es posible interpretar cabalmente los fenómenos fuera del marco cuántico. La Mecánica Clásica no es capaz de dar una interpretación aceptable del enlace químico o de las propiedades eléctricas de un sólido. Es más, si se quiere dar una interpretación razonablemente convincente de un fenómeno macroscópico, es decir de aquel en el que intervienen objetos del tamaño de los que conforman nuestro entorno usual, es preciso que partamos de la descripción de los componentes, átomos, electrones, etc. para poder lograr una descripción del sistema completo y responder al análisis de sus propiedades. Cada vez más frecuentemente se describen objetos macroscópicos cuyo comportamiento es cuántico. Aceptado este análisis, estamos justificando que la comprensión actual de los fenómenos naturales descansa en la interpretación cuántica de los mismos.

La contribución conceptual de mayor alcance de la Cuántica ha sido poner en pie de igualdad a la materia y a la radiación. Antes de la introducción de la interpretación cuántica ambas tenían marcos diferentes, al ser consideradas como fenómenos distintos. Las leyes que las regían eran diferentes. La Mecánica Clásica, introducida por Newton, gobernaba las leyes del mundo material y el éxito alcanzado no planteaba dudas sobre su adecuación. Pero la teoría del electromagnetismo de Maxwell vino a proporcionar el marco para interpretar fenómenos diversos como electricidad, magnetismo y óptica, hasta entonces considerados procesos sin relación entre ellos. El descubrimiento de las ondas herztianas vino a evidenciar la validez de la teoría electromagnética clásica, propugnada por Maxwell. Con ambos marcos en funcionamiento, las interacciones entre radiación y materia, requirieron de la proposición de las fuerzas de Lorentz. El marco teórico parecía responder a la física experimental de la época, que encontraba explicación satisfactoria en aquél [3].

A finales del siglo XIX comenzaron a aparecer datos experimentales que no encontraban satisfactoria interpretación en los marcos teóricos disponibles. A principios del siglo XX la proposición de las mecánicas relativista y cuántica supusieron una

revolución en muchos aspectos que pertenecían a ámbitos diferentes. Por un lado la Mecánica Clásica no se mostraba válida en los casos en que los cuerpos materiales se movían a la velocidad de la luz. Pero esta velocidad se alcanza con facilidad en los dominios atómico y subatómico, descritos por la Mecánica Cuántica. La Mecánica Clásica, en ambos casos, viene a ser como una aproximación de ambas teorías, cuando la escala es macroscópica, es decir cuando la velocidad del cuerpo es pequeña, comparada con la de la luz, y su tamaño es mucho mayor que el atómico.

La teoría Cuántica nos permite comprender la existencia de un cuerpo macroscópico y describir sus propiedades asociadas. Las teorías cuántica y relativista no forman parte, todavía, de un cuerpo teórico unificado y la mayoría de los procesos de interés a nivel atómico y molecular se explican en el marco de una teoría Cuántica no relativista.

A comienzos del siglo XX se llevaron a cabo varios descubrimientos que entrañaban preguntas y sugerían experimentos que escapaban de la Física Clásica. Los primeros descubrimientos [4, 5, 6], suponian que la radiación óptica está compuesta de paquetes discretos de energía que pueden estar bien localizados en el espacio y en el tiempo. Esta localización entraba en contradicción con el conocimiento que se tenía hasta ese momento, que estaba basado en la teoría de Maxwell que había triunfado en la descripción de la luz como una onda electromagnética. La segunda aportación fue la propuesta teórica de de Broglie [7] y la evidencia experimental de Davisson y Germer [8] de que las partículas pesadas también se propagaban como las ondas. Estas propuestas debieron ser impactantes cuando se formularon y siguen dando que pensar todavía hoy, ya que se sigue asociando, generalmente, la noción de localidad puntual con una partícula, aún cuando las ondas tienen extensión espacial. Así que, la observación de ambos fenómenos conjuntamente en un experimento lleva de la mano el concepto de deslocalización, que supera al concepto de extensión, ya que los objetos cuánticos simples son capaces de comportarse simultáneamente en el sistema espacio-tiempo de forma que no puede explicarse en términos clásicos.

El experimento de la doble rendija para ilustrar la dualidad onda-corpúsculo es uno de los más simples y más generales y es

el prototipo de los experimentos que se llevan a cabo todavía en la actualidad, como veremos. La naturaleza ondulatoria de la materia es una piedra angular de la Mecánica Cuántica, aún cuando escapa e la percepción cotidiana. La insignificancia cuantitativa de la constante de Planck y, por tanto, de la longitud de onda de de Broglie de una partícula macroscópica es la responsable de la falta de observabilidad de los efectos cuánticos en el mundo clásico. Pero resulta interesante interrogarse sobre ¿donde están los límites de la Física Cuántica y como se pueden visualizar los efectos cuánticos en el mundo mesoscópico para objetos cada vez mayores en tamaño, masa y complejidad.

Tras la proposición de de Broglie de la hipótesis ondulatoria de las partículas materiales [7] se llevaron a cabo experimentos verificándola para electrones [8] átomos y dímeros [9] y neutrones [10]. Los experimentos de Young de la doble rendija se han realizado para electrones [11], neutrones [12], átomos [13] y pequeñas moléculas y cluster de gas noble [14, 15]

Las técnicas para estudiar la física de ondas materiales se han ido sofisticando para tratar la interacción de las partículas y la luz cada vez más precisamente. En 1975 se pretendía ralentizar y enfríar los átomos empleando la dispersión de luz [16, 17]. La técnica recibió el reconocimiento con la concesión del premio Nobel en 1997 para los que propusieron y desarrollaron el enfriamiento con láser [18, 19, 20] y en 2001 por el logro experimental de los condensados de Bose-Einstein con vapores atómicos diluidos [21, 22]. En los condensados de Bose-Einstein todos los átomos tienen longitudes de onda de de Broglie extremadamente grandes y son coherentes en distancias macroscópicas hasta de un milímetro. Pero al igual que los cuantos de luz en los haces láser, los átomos en un condensado de Bose-Einstein se mantienen suficientemente apartados como para que su interacción explique el espaciado de las franjas de interferencia con la longitud de onda de de Broglie correspondiente a un átomo individual, en lugar de una longitud de onda correspondiente a la masa total del condensado.

¿Qué ocurre si la interacción entre partículas es más fuerte? Los átomos unidos covalentemente forman una nueva entidad, molécula o cluster y la longitud de onda de de Broglie de este

sistema está definida por la masa total de todos los átomos y la velocidad del centro de masas del sistema ligado. La interferencia con moléculas hace mucho que se conoce, desde los primeros balbuceos en 1930 con las experiencias de Stermann y Stern [9] que evidenció la interferencia con difracción de H_2 en superficies de LiF cristal. Las moléculas diatómicas tuvieron que esperar que la interferencia atómica se desarrollara. En 1994 se construyó un interferómetro de Ramsey-Bordé para el dímero de iodo [23] y posteriormente para K_2 [24]. Se utilizó un interferómetro de Mach-Zehnder para Na_2 [25]. El análogo de campo cercano al interferómetro de Mach-Zehnder, el de Talbot-Lau se ha aplicado a Li_2 [26]. La difracción con redes de difracción nanofabricadas se ha revelado como un procedimiento más efectivo para estudiar los dímeros de helio débilmente ligados [15] e incluso para determinar la energía de enlace [27]. Recientemente se han llevado a cabo experimentos que superan tanto en masa como en complejidad las partículas anteriormente estudiadas en varios órdenes de magnitud, como ocurre con los fullerenos C_{60} [28].

A partir de la detección de una depresión en el espectro de haces moleculares de moléculas de NO y N_2O [29] [30], [31],[32] y [33] se inicia el estudio teórico con la formulación de un modelo de dos estados capaz de rendir cuenta de la relación entre el desfase introducido por la acción de un campo oscilante de radiofrecuencias, que actúa simultáneamente a un campo estático que induce el efecto Stark en los niveles de energía moleculares generándose una superposición coherente de los subestados, cuyo desfase es responsable de la estructura de franjas que caracteriza a la interferencia de las ondas de materia. El grupo de investigación en Láseres, espectroscopía molecular y Química Cuántica de la Universidad de Murcia, que me honro en coordinar, ha colaborado con el grupo de investigación en Láseres y Haces moleculares del Instituto Pluridisciolinar de la Universidad Complutense de Madrid, coordinado por el Profesor Dr. Angel González Ureña en el desarrollo teórico que ha permitido formular un modelo capaz de justificar el proceso y colabora en la actualidad en el desarrollo de aspectos esenciales relacionados con la una justificación detallada del proceso que permite entrever la importancia de la propuesta de un interferómetro molecular operativo con haces ob-

tenidos en expansiones supersónicas [34]. Se abre una perspetiva interesante para el estudio, tanto de aspectos fundamentales como de aplicaciones, en orden a disponer de un mecanismo capaz de generar interferencias moleculares que supone una aportación significativa en el escenario de la interacción de ondas materiales de origen molecular y una forma directa y asequible de producir estados entrelazados moleculares con un dispositivo muy similar del utilizado en las experiencias de resonancia eléctrica de haces moleculares [35].

En este trabajo incluimos una breve perspectiva de los aspectos fundamentales de las interferencias de la radiación y los experimentos más destacados que han introducido aspectos básicos en el desarrollo de las diversas técnicas, para pasar a continuación una breve revisión a las técnicas de interferencias atómicas y moleculares, en orden de tamaño creciente de los sistemas en los que se han aplicado y finalizar con la exposición de las últimas aportaciones relacionadas con la superposición coherente de estados moleculares producidos por la acción simultánea de campos eléctricos estático y oscilante, capaces de introducir desfase en los brazos del interferómetro molecular construido con un dispositivo de resonancia eléctrica de haces moleculares que origina las franjas de interferencia producidas por el comportamiento ondulatorio de la materia operada en estas condiciones.

CUANTOS

Newton propuso una naturaleza particular para la radiación y su autoridad científica impidió poner en discusión sus propuestas durante mucho tiempo. En la primera mitad del siglo XIX se evidenció la naturaleza ondulatoria de la luz: difracción e interferencias. Esta fue la razón de la integración de la óptica en la teoría electromagnética, en la que la velocidad de la luz viene dada en términos de constantes eléctricas y magnéticas y la polarización se puede explicar gracias al carácter vectorial del campo eléctrico.

Pero el estudio de la radiación del cuerpo negro, a finales del siglo XIX, enfrentó a la teoría electromagnética con la imposibilidad de su explicación. Planck introdujo en 1900 la hipótesis de la cuantización de la energía por la que una onda electromagnética

de frecuencia ν solamente puede tener energías múltiplo del cuanto $h\nu$, siendo h una constante fundamental. Einstein generalizó la hipótesis y resucitó la teoría particular que Newton propusiera tres siglos antes, proponiendo que la luz está constituida por un haz de fotones, cada uno de los cuales tiene una energía $h\nu$, con lo que explicó el efecto fotoeléctrico. La existencia del fotón se demoró veinte años, hasta que Compton lo detectó en 1924 [3].

Pero asociado a esta interpretación, la materia interacciona con la radiación electromagnética mediante unos procesos elementales indivisibles en los que la radiación se comporta de forma corpuscular a través de los fotones, que son las partículas que integran la misma. Por tanto, la energía, E y el momento $\mathbf{p}$ son los parámetros que la caracterizan. Pero los parámetros que caracterizan a las ondas son la frecuencia angular ω y el vector de ondas $\mathbf{k}$, que satisfacen las relaciones

$$\omega = 2\pi\nu$$

$$|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{1}$$

siendo ν la frecuencia y λ la longitud de onda. La unificación de ambos marcos proporciona las ecuaciones de Planck-Einstein

$$E = h\nu = \hbar\omega$$
$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$$

siendo $\hbar = h/2\pi$. En este proceso individual de choque entre la radiación y la materia, tanto la energía como el momento se deben conservar.

En espectroscopía se llevan a cabo medidas de observables en los átomos y las moléculas, utilizando como herramienta la radiación electromagnética. El observable usual es la energía total del sistema que se concreta en la determinación de las diferencias de energía entre los niveles posibles de los átomos y las moléculas, normalmente en resonancia con la radiación electromagnética. El estado es la clave del tratamiento. Designamos por $|n\rangle$ al estado al que corresponde la energía E_n o un momento angular $\sqrt{j(j+1)}\hbar$, donde el número cuántico, j, es el que convencionalmente se emplea para el momento angular.

DIFRACCIÓN E INTERFERENCIA

Las propuestas de Planck y Einstein hicieron retornar a la teoría corpuscular de la radiación. Pero ¿qué ocurre con la interpretación ondulatoria de la misma?. La naturaleza ondulatoria de la luz se evidencia con los fenómenos de difracción y de interferencia. ¿Se pueden explicar los fenómenos típicamente ondulatorios como la interferencia o la difracción en un marco corpuscular?

La difracción de un haz de luz plano paralelo de longitud de onda λ por una ventana de anchura d tiene dos regímenes diferentes, denominados difracción de Fresnel y difracción de Fraunhofer, según la distancia entre la rendija y la pantalla. Si esa distancia es muy superior a la distancia de Rayleigh (d^2/λ), el patrón de difracción se dice que es de campo lejano (Fraunhofer) y si esa distancia cumple $\lesssim d^2/\lambda$, entonces se dice que el régimen es de campo cercano. En la Figura (1) incluimos un esquema de la difracción de un haz incidente de ondas planoparalelas que inciden sobre una rendija de anchura d y sufren difracción con lo que proyectan un patrón de interferencia sobre una pantalla. Se ilustra el límite de Fraunhofer que corresponde a que la distancia L entre la rendija y la pantalla es grande.

Tomando como ejemplo el caso de la difracción de Franunhofer, el patrón que se observa en la pantalla lo podemos obtener sumando todas las contribuciones del campo sobre la pantalla comprendidas en el angulo que consideremos θ,

$$\mathcal{E}(\theta) \propto \int_{-d/2}^{+d/2} exp(-ikx \operatorname{sen}\theta) dx$$

donde $kx \operatorname{sen}\theta$ es el desfase relativo en la posición x en la dirección de la ventana, siendo k el vector de ondas, definido en la ecuación (1). Si efectuamos la integral y tomamos el cuadrado del módulo obtenemos la intensidad

$$I(\theta) \propto \left(\frac{\operatorname{sen}\beta}{\beta}\right)^2$$

siendo

$$\beta = \frac{1}{2} kd \operatorname{sen}\theta$$

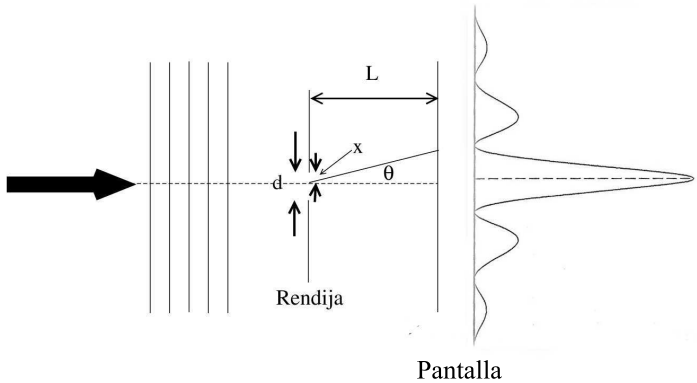

Figura 1 Esquema de difracción de un haz plano paralelo por una rendija, correspondiente al límite de Fraunhofer.

Este patrón de difracción presenta un máximo en $\theta = 0$ y hay mínimos en $\beta = m\pi$, para m entero y máximos para $\beta = (2m + 1)\pi/2$, para $m \geq 1$. Las intensidades del segundo máximo son menores del 5 % de la del máximo principal y siguen decreciendo para los máximos subsiguientes. El ángulo al que tiene lugar el primer mínimo viene dado por

$$\operatorname{sen}\theta_{min} = \pm\frac{\lambda}{d}$$

que para ángulos pequeños se puede aproximar por $\theta_{min} = \pm\frac{\lambda}{d}$ y por ello se suele considerar que la difracción por una ventana de este tipo provoca una dispersión de $\approx \lambda/d$. Cuando la ventana tiene otras formas, el cálculo es similar. En el caso de ser una ventana circular, usual en telescopios y microscopios, para un diámetro D, la intensidad tiene simetría circular en torno al eje, con un máximo en $\theta = 0$ y un mínimo dado por

$$\operatorname{sen}\theta_{min} = 1.22\frac{\lambda}{D}$$

Se obtienen patrones de interferencia cuando una onda de luz se divide y posteriormente se recombina con una diferencia de fase entre los dos haces. Hay muchos ejemplos de interferencias, pero el más caracterizado es el de la interferencia de la doble ventana de Young. En la Figura (2) se puede observar un esquema del experimento. La luz monocromática emitida por una fuente (F) incide en una pantalla opaca (P_1) provista de dos rendijas R_1 y R_2 e ilumina una placa posterior (P_2), donde alternan zonas claras y oscuras. Si bloqueamos una de las rendijas, por ejemplo la

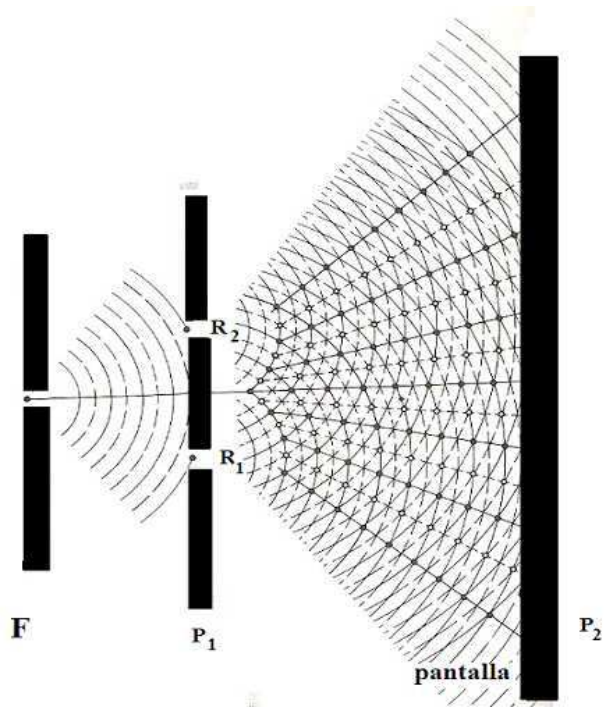

Figura 2 Diagrama de Young del experimento de interferencia de la luz por dos rendijas

R_2 obtenemos una distribución de intensidad I_1 que corresponde al patrón de difracción de la rendija R_1. Lo mismo acontece si bloqueamos la rendija R_1, obteniendo el patrón de difracción de la rendija R_2. Pero cuando mantenemos abiertas las dos rendijas, obtenemos las franjas de interferencias, y ahora la intensidad no

es la suma de las intensidades que provienen por separado de las dos rendijas, R_1 y R_2.

Si excitamos las ondas sobre una superficie de agua y la dejamos propagar a través del orificio practicado en una barrera observaremos unas ondas circulares que emergen por el otro lado de la barrera, de acuerdo con el principio de Huygens. Si abrimos dos orificios en la barrera creamos dos regiones donde el comportamiento será el mismo que en el caso anterior en cada orificio, pero hay zonas donde el agua permanece inalterada, lo que se explica en términos de que se superponen las ondas superficiales y los mínimos de una onda se compensan por los máximos de la otra en lugares concretos. Este es el fenómeno denominado interferencia. Solamente se puede observar si se sincronizan las perturbaciones que proceden de las dos rendijas, lo que implica que tengan un buen comportamiento y una relación de fase constante, de forma que podamos interpretar que entre si son coherentes. En el caso del agua, parece intuitivo dado que el agua está compuesta por muchas partículas que interactúan entre sí. Otra cosa es si efectuamos el experimento con partículas aisladas que las hacemos incidir sobre la rendija de una en una.

Vamos a introducir el interferómetro de Michelson que nos servirá para introducir, a continuación, el concepto de coherencia. La versión más simple consta de un desdoblador de haz 50:50 y dos espejos M1 y M2. La luz incide en el desdoblador del haz y se divide dirigiéndose a los dos espejos. La luz reflejada se recombina en el desdoblador del haz y produce un patrón de interferencia en la salida. La longitud del camino recorrido en uno de los brazos se puede modificar trasladando uno de los espejos en dirección paralela al haz.

Si suponemos que el haz de entrada consta de haces paralelos de una fuente mnonocromática linealmente polarizada de longitud de onda λ y de amplitud $\mathcal{E}_0$. La campo en la salida se obtiene sumando las dos contribuciones de las ondas que se reflejan en los espejos M1 y M2 cuyas fases están determinadas por la longitud del camino recorrido,

$$\mathcal{E}^{salida} = \mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 = \frac{1}{2}\mathcal{E}_0 e^{i2kL_1} + \frac{1}{2}\mathcal{E}_0 e^{i2kL_2} e^{i\Delta\phi}$$

$$\mathcal{E}^{salida} = \frac{1}{2}\mathcal{E}_0 e^{i2kL_1}(1 + e^{i2k\Delta L}e^{i\Delta\phi}) \qquad (2)$$

donde $\Delta L = L_2 - L_1$ y $k = 2\pi/L$ y el factor $\Delta\phi$ contiene el desfase entre los dos caminos recorridos por la luz en los dos brazos. El campo máximo se obtiene cuando se cumple

$$\frac{4\pi}{\lambda}\Delta L + \Delta\phi = 2m\pi$$

y el mínimo cuando se cumple

$$\frac{4\pi}{\lambda}\Delta L + \Delta\phi = (2m+1)\pi$$

con m entero. Al barrer con L_2 se obtienen franjas brillantes y oscuras con un periodo $\lambda/2$.

El interferómetro es, pues, un dispositivo sensible a la diferencia de caminos ópticos recorridos en los dos brazos. Una aplicación interesante es la medida de índices de refracción en medios diluidos, como los gases. Si se dispone el interferómetro de forma que los dos brazos tengan una longitud aproximadamente igual, ($L_1 \approx L_2$), y se intercala una célula de longitud L en uno de los brazos, primeramente vacía y después se va llenando con un gas de índice de refracción n, a partir del desplazamiento de las franjas en los dos casos, se puede obtener el cambio de la longitud del camino recorrido en los dos brazos, $2(n-1)L$ ($2nL$ en uno de los brazos y $2L$ en el otro, porque la longitud de los brazos la hemos establecido igual), a partir del cual se puede determinar el índice de refracción, n.

COHERENCIA

En la descripción que hemos efectuado del interferómetro de Michelson hemos idealizado que el desfase solamente se debe a la diferencia de caminos recorridos en los dos brazos, $2\Delta L$, lo cual implica asumir que la frecuencia de la luz es estable. Una descripción más realista es suponer que la luz de salida del interferómetro contiene un rango de frecuencias angulares $\Delta\omega$, con lo cual es posible que aparezcan franjas brillantes en la misma

posición que franjas oscuras, lo que modificaría el patrón de interferencias. Esto implica que la fuente impone límites prácticos a la diferencia de recorridos que permiten observar las franjas.

A la propiedad que refleja la estabilidad de la luz se le denomina coherencia, que puede ser espacial o temporal. La segunda está cuantificada por el tiempo de coherencia τ_c. La longitud de coherencia viene dada por

$$L_c = c\tau_c$$

El tiempo de coherencia proporciona la duración en la que el tren de ondas permanece estable. Si conocemos la fase de una onda en una posición z al tiempo t_1, la fase que tendrá en esa misma posición en otro tiempo t_2 vendrá afectada por una incertidumbre pequeña cuando $|t_2 - t_1| \ll \tau_c$, mientras que será muy alta cuando $|t_2 - t_1| \gg \tau_c$. De forma similar diremos que la certidumbre en la posición será pequeña cuando se cumpla $|z_2 - z_1| \ll L_c$ y será elevada cuando $|z_2 - z_1| \gg L_c$, siendo z_1 la posición a la que conocemos la fase a un tiempo t y z_2 la posición a la que pretendemos conocer la fase al mismo tiempo t. Como la diferencia de fase entre los dos campos que interfieren en un interferómetro de Michelson es debida a una diferencia en el camino recorrido entre ambos brazos de $2\Delta L$, solamente podremos observar interferencias cuando esta diferencia de caminos recorridos satisfaga la condición

$$2\Delta L \lesssim L_c \tag{3}$$

El tiempo de coherencia se comprende analizando los factores que lo determinan. Si tomamos una luz filtrada a partir de una línea espectral producida en una lámpara de descarga con una anchura espectral $\Delta\omega$, estará afectada por un ensanchamiento debido a la presión y derivado de las colisiones atómicas que acontecen con un tiempo de colisión $\tau_{colisión}$. El modelo representativo de esta luz puede consistir en un conjunto de átomos excitados al azar por una descarga eléctrica que emiten a partir de los estados excitados a los que resultan bombeados, con una fase que se mantiene constante hasta que el átomo sufre una colisión, momento en el que cesa la emisión al desexcitarse en la misma. Esto supone que el tiempo de colisión iguala al tiempo de coherencia. Pero

ese mismo tiempo de colisión es el que determina la anchura de la línea espectral, con lo que

$$\tau_c \approx \frac{1}{\Delta\omega}$$

De esta forma, vemos que el tiempo de coherencia está determinado por la anchura espectral de la luz. Esto conlleva que una luz perfectamente monocromática, para la que la anchura de la línea espectral es nula, $\Delta\omega = 0$, tendrá un tiempo de coherencia infinito. La fuentes térmicas, al contrario, tendrán un tiempo de coherencia muy pequeño. Entre ambos extremos disponemos de la luz con coherencia parcial que se cuantifica con una función de correlación de primer orden, dada por

$$g^{(1)}(\tau) = \frac{\langle \mathcal{E}^*(t)\mathcal{E}(t+\tau)\rangle}{\langle |\mathcal{E}(t)|^2\rangle} \tag{4}$$

donde

$$\langle \mathcal{E}^*(t)\mathcal{E}(t+\tau)\rangle = \frac{1}{T}\int_T \mathcal{E}^*(t)\mathcal{E}(t+\tau)dt$$

Para un campo cuasi-monocromático, $\mathcal{E}(t)$, al que corresponde una frecuencia central de ω_0,

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 e^{i\omega_0 t} e^{i\phi(t)}$$

la función de correlación de primer orden es

$$g^{(1)}(\tau) = e^{-i\omega_0\tau}\langle e^{i[\phi(t+\tau)-\phi(t)]}\rangle$$

que contiene una parte real que oscila con una frecuencia de $\frac{2\pi}{\omega_0}$ y esta oscilación es la que origina el patrón de franjas que genera la interferencia. Si analizamos la información que contiene la anterior fórmula vemos que

$$\begin{array}{llll}
\tau = 0 & |g^{(1)}(0)| = 1 & & \\
0 < \tau < \tau_c & \phi(t+\tau) \approx \phi(t) & |g^{(1)}(\tau)| \backsim 1 & \\
\text{Si } \tau \uparrow & |g^{(1)}(\tau)| \downarrow & \tau \gg \tau_c & \langle e^{i[\phi(t+\tau)-\phi(t)]}\rangle \approx 0 \\
 & & & \Rightarrow |g^{(1)}(\tau)| = 0
\end{array}$$

con lo que al superar el tiempo de coherencia la función de correlación de primer orden cae a cero, mientras que cuando no se supera el tiempo de coherencia se mantenía en uno.

Dependiendo de la función que consideremos para el ensanchamiento espectral de la luz parcialmente coherente obtendremos diferentes funciones de correlación de primer orden

Forma de línea	**Función de correlación**	**Tiempo de coherencia**
Lorentziana	$\lvert g^{(1)}(\tau)\rvert = e^{-i\omega_0\tau}e^{(-\lvert\tau\rvert/\tau_c)}$	$\tau_c = \frac{1}{\Delta\omega}$
Gausiana	$\lvert g^{(1)}(\tau)\rvert = e^{-i\omega_0\tau}e^{-\frac{\pi}{2}\left(\frac{\tau}{\tau_c}\right)^2}$	$\tau_c = \frac{(8\pi\ln 2)^{\frac{1}{2}}}{\Delta\omega}$

En la Gráfica (3) representamos la función de correlación de primer orden en función del tiempo de retardo,donde hemos to-

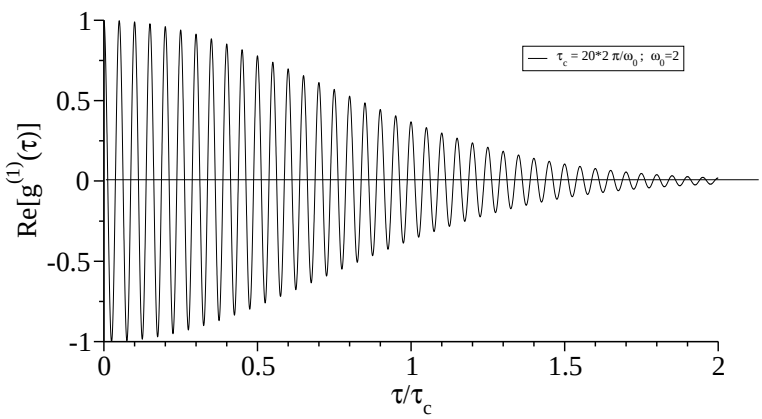

Figura 3 Función de correlación de primer orden en función del tiempo de retardo

La intensidad observada es proporcional al valor medio del módulo del campo eléctrico al cuadrado

$$I(t) \propto \langle \mathcal{E}(t)^* \mathcal{E}(t) \rangle$$

Para el interferómetro de Michelson, el campo eléctrico a la salida viene dado por la Ecuación (2). Si suponemos que la intensidad media es constante, el patrón de interferencia dependerá solamente de la diferencia de tiempo entre los campos que interfieren (retardo), τ, y como la potencia óptica es proporcional al cuadrado

del campo, un desdoblador de haz 50:50 implica que el campo se reduce en un factor de $\sqrt{2}$ a la salida, de forma que podemos escribir

$$\mathcal{E}^{salida}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\mathcal{E}(t) - \mathcal{E}(t+\tau)]$$

ya que el desdoblador del haz introduce un desfase de π entre las dos salidas, consecuencia de la necesaria conservación de la energía. La intensidad observada a la salida es proporcional al valor medio del módulo del campo al cuadrado,

$$\begin{aligned} I(\tau) =& \propto \langle \mathcal{E}^{salida^*}(t)\mathcal{E}^{salida}(t)\rangle \\ & \propto \frac{1}{2}(\langle \mathcal{E}^*(t)\mathcal{E}(t)\rangle + \langle \mathcal{E}^*(t+\tau)\mathcal{E}(t+\tau)\rangle \\ & - \langle \mathcal{E}^*(t)\mathcal{E}(t+\tau)\rangle - \langle \mathcal{E}^*(t+\tau)\mathcal{E}(t)\rangle) \end{aligned}$$

Al suponer que la fuente de luz mantiene la intensidad media constante, los dos primeros términos son iguales y el tercero y cuarto son congujados complejos uno de otro, por tanto, tenemos

$$I(\tau) =\propto \langle \mathcal{E}^*(t)\mathcal{E}(t)\rangle - \mathrm{Re}[\langle \mathcal{E}^*(t)\mathcal{E}(t+\tau)\rangle]$$

De forma que sustituyendo $\langle \mathcal{E}^*(t)\mathcal{E}(t)\rangle$ a partir de la función de correlación de primer orden, dada por la Ecuación (4) obtenemos

$$I(\tau) =\propto \underbrace{\langle \mathcal{E}^*(t)\mathcal{E}(t)\rangle}_{I_0} \left(1 - \mathrm{Re}[g^{(1)}(\tau)]\right) = I_0 \left(1 - \mathrm{Re}[g^{(1)}(\tau)]\right)$$

Si designamos por I_{max} y por I_{min} a las intensidades máxima y mínima, respectivamente, registradas en la interferencia, que vendrán dadas por

$$\begin{aligned} I_{max} &= I_0 \left(1 + |g^{(1)}(\tau)|\right) \\ I_{min} &= I_0 \left(1 - |g^{(1)}(\tau)|\right) \end{aligned}$$

y si definimos la visibilidad como

$$\text{visibilidad} = \frac{I_{max} - I_{min}}{I_{max} + I_{min}}$$

tenemos

$$\text{visibilidad} = |g^{(1)}(\tau)|$$

Así vemos que la visibilidad viene determinada cuantitativamente por la coherencia de la luz. Cuando representamos la intensidad observada en un interferómetro de Michelson en función de la diferencia de distancia recorrida en ambos brazos del interferómetro, ΔL, tendría el mismo aspecto que el que se observa en la Figura (3) ya que $\tau = \frac{2\Delta L}{c}$.

En la Tabla adjunta incluímos las propiedades de coherencia en los casos más genuinos

Luz	**Ancho espec.**	**t de coher.**	**Coher.**	$\lvert g^{(1)}(\tau)\rvert$
Monocro.	0	Infinito	Perfecta	1
Incoherente	Infinita	0	Ninguna	0
Caótica	$\Delta\omega$	$\backsim \frac{1}{\Delta\omega}$	Parcial	$0 < \lvert g^{(1)}(\tau)\rvert < 1$

SUPERPOSICIÓN DE ESTADOS COHERENTES

La interacción entre la radiación y la materia está descrita por el postulado de Bohr, formulado en 1913, que supone un tránsito de un nivel E_i a otro E_f, cuando se absorbe o se emite un fotón de frecuencia angular ω que satisface la condición

$$E_f - E_i = \hbar\omega$$

Einstein cuantificó en 1916 la velocidad a la que tiene lugar el proceso de absorción o emisión de los cuantos. Las transiciones ópticas se reflejan en la Figura (4). Los procesos de absorción y emisión estimulada tienen lugar mediante la destrucción de un fotón, proceso simultáneo a la excitación del átomo o molécula, en el primer caso, y la creación de un fotón que se agrega al campo, en el segundo caso, proceso simultáneo, en este caso a la desexcitación del átomo o molécula. Ambos procesos, que implican el paso del sistema de un estado a otro, se denominan transiciones. Estos procesos son los se estudian en la rama de la Ciencia que se ha dado en denominar Espectroscopía, que se ocupa de la interacción de la radiación con la materia y de los procesos que tienen

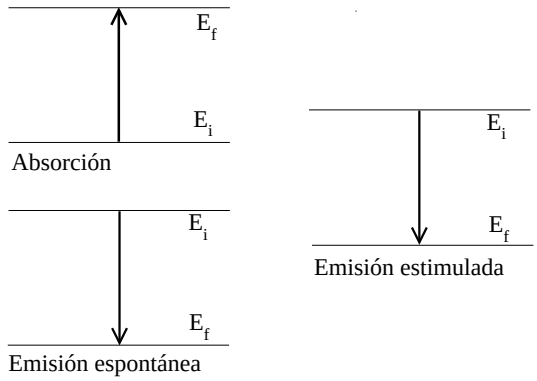

Figura 4 Transiciones ópticas entre niveles de energía cuantizados

lugar. Para estudiar el fenómeno que tiene lugar en el tiempo que transcurre desde que la radiación incide sobre la materia, hasta que se completa el tránsito, es preciso estudiar la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, considerando que el sistema está constituido por la materia, átomo o molécula más la radiación. El caso particular de la emisión espontánea tiene lugar cuando el sistema solamente está constituido por el átomo o molécula, sin la presencia de la radiación. En este caso se interpreta fenomenológicamente como un proceso al azar, esclusivamente gobernado por las probabilidades de decaimiento, tal como lo concibió Einstein, o en mayor profundidad se interpreta como un evento impulsado por un fotón del vacío, en cuyo caso el comportamiento azaroso se atribuyue al ruido cuántico de las fluctuaciones de punto cero del campo electromagnético.

Es usual desarrollar la interacción de la radiación con la materia haciendo uso de la aproximación de dos niveles, tanto más adecuada en función de la coincidencia de la frecuencia de la radiación con una de las transiciones que tienen lugar en el sistema, átomo o molécula, que tienen muchos niveles entre los que se pueden dar los tránsitos, pero que se consideran los dos implicados directamente y se omite el resto, como se ejemplifica en la Figura (5). La interacción resonante correspondiente a la coincidencia entre la frecuencia de la radiación y la de la transición es

mucho más fuerte que cualquier otra no resonante y esto permite despreciar esta última interacción frente a la primera, en buena aproximación. Clásicamente se interpreta que la radiación induce

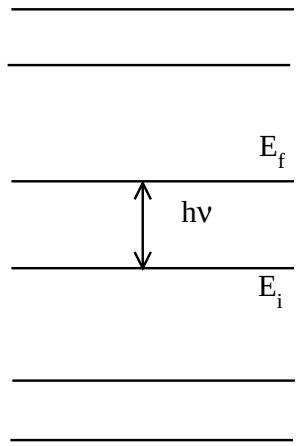

Figura 5 Aproximación de dos niveles

oscilaciones de naturaleza dipolar en los sistemas, que se ponen a irradiar a la misma frecuencia. Así que, en el caso de que la frecuencia coincida con las naturales del sistema las oscilaciones inducidas son mucho mayores y la interacción es fuerte. En el caso de que la frecuencia esté alejada de la natural del sistema, es decir, fuera de resonancia, la magnitud de las oscilaciones inducidas por la radiación en el sistema serán pequeñas y la interacción también. Esta es la base de la aproximación dipolar que desprecia las interacciones no resonantes frente a las resonantes.

La aproximación es muy buena en muchos casos, aunque como podemos observar en la Figura (5) cualquiera de los niveles puede estar inmerso en otros procesos en los que estén implicados otros niveles además de los considerados. En este caso, la transición analizada se ve mitigada y una de las formas de corregir el análisis es mediante la incorporación del damping que afecta a los niveles tratados.

La inspiración del tratamiento de un sistema de dos niveles tiene mucho que ver con el tratamiento de un sistema de dos niveles de espíndesarrollado por Rabi [3]. Al aplicar un campo magné-

tico a un sistema los niveles de espín, degenerados inicialmente, se desdoblan. La consecuencia en átomos es el conocido efecto Zeeman asociado a este desdoblamiento. La Resonancia Magnética Nuclear (RMN) se estudió en la década de los 40 del siglo pasado en términos de la interacción resonante de la radiación de microondas y los estados de espín nuclear desdoblados, mediante la aplicación de un campo magnético estático, fenómeno conocido como efecto Zeeman. Muy posteriormente, el advenimiento de los láseres en la década de los 60 ha permitido observar el mismo tipo de interacciones entre sistemas atómicos de dos niveles y frecuencias ópticas.

Consideremos un sistema cuántico de dos niveles, como el ejemplificado en la Figura (6) que se compara con el sistema de dos espines, desdoblado por la presencia de un campo magnético. Suponemos que tenemos forma de medir para identificar cuando

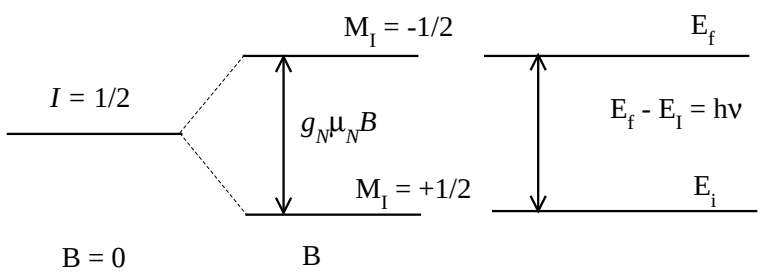

Figura 6 Sistema de dos niveles

el sistema se encuentra en el estado superior. En el caso del espín nuclear, el experimento de Stern-Gerlach nos permite determinar I_z estudiando la deflexión provocada por un imán sobre los haces atómicos, ya que la fuerza ejercida por un campo magnético no uniforme sobre un dipolo magnético viene dada por

$$F_z = \mu_z \frac{dB}{dz} \tag{5}$$

donde μ_z es la componente z del momento dipolar, dada por

$$\mu_z = -g_J \mu_B M_J$$

y los diferentes estados M_J suponen un total de $2J+1$ deflexiones diferentes para los valores de M_J correspondientes a cada J. Si el experimento lo llevamos a cabo muchas veces para un conjunto de átomos idénticos obtendríamos diferentes resultados acomodados a las $2J+1$ posibles deflexiones correspondientes.

Stern-Gerlach emplearon originalmente átomos de plata y observaron dos deflexiones diferentes. Dado que el estado fundamental de la Plata es un término 5s $^2S_{1/2}$, al que corresponden un momento angular orbital $L = 0$, un espín $S = 1/2$ y, por tanto, un momento angular total $J = 1/2$ la interpretación es que los átomos poseen un momento dipolar magnético, aún cuando $L = 0$. Esto contrasta con que clásicamente no cabe esperar ninguna deflexión, ya que al no tener el átomo momento angular orbital no le corresponde clásicamente, un dipolo magnético. El descubrimiento permitió dar un paso decisivo para descubrir el espín del electrón. Como revela la Ecuación (5) el campo magnético no uniforme es el que genera el desdoblamiento.

El experimento de Stern-Gerlach se puede analizar a partir del hecho de que el imán correlaciona el movimiento de la partícula con su espín. En la Figura (7) las partículas de espín 1/2 que sufren deflexión en un experimento de Stern-Gerlach son sometidas a un segundo experimento de Stern-Gerlach y observamos que siempre sufren la deflexión en el mismo sentido.

Antes de pasar a través del primer imán, las partículas pueden tener cualquier espín, hacia arriba o hacia abajo, con una probabilidad del 50 %. Pero después que han atravesado el primer imán la función de onda viene descrita por una combinación lineal de las funciones de onda espaciales afectadas por las funciones de espín correspondientes, es decir

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{arriba}(\mathbf{r}) | \uparrow \rangle + \psi_{abajo}(\mathbf{r}) | \downarrow \rangle \right]$$

y como la probabilidad es proporcional a $|\psi|^2$, obtenemos una probabilidad de 50:50 para cada opción del espín. Una vez que

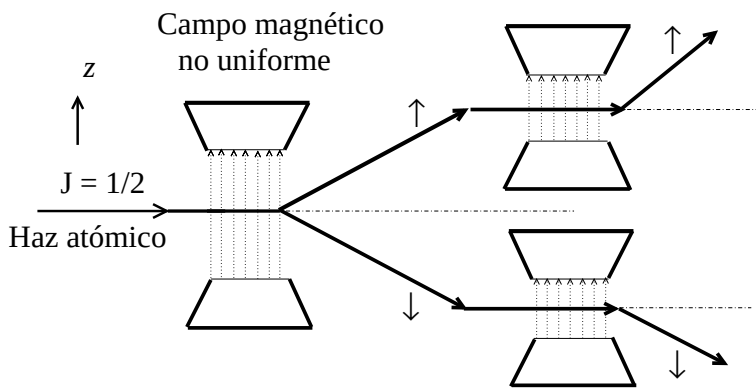

Figura 7 Stern-Gerlach múltiple

la deflexión ha producido el desdoblamiento del espín, las sucesivas deflexiones acontecen para espines del mismo tipo y siempre producen el mismo efecto producido en el primer imán.

Si el experimento se lleva a cabo empleando imanes que ocupan posiciones ortogonales, como los que se incluyen en la Figura (8) en la que los imanes primero y tercero actúan según la dirección z, mientras que el central actua en la dirección x, ortogonal con los anteriores.

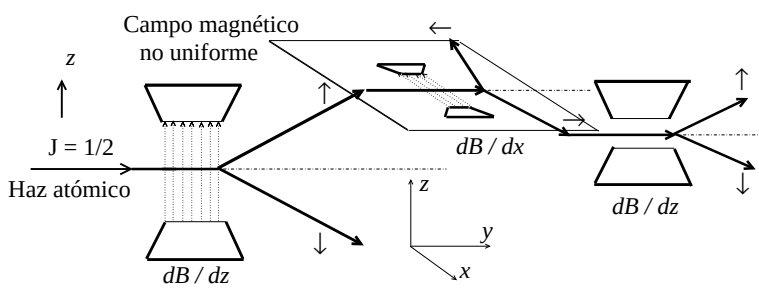

Figura 8 Stern-Gerlach múltiple con ejes ortogonales

El eje del imán central está rotado 90° con respecto a los otros dos, con lo que ahora la deflexión se hace a izquierda y derecha

de nuestra posición en el eje z. La disposición del tercer campo magnético es tal que solamente recibe a las partículas desviadas hacia la derecha en el campo magnético no uniforme central. Si tenemos en cuenta que los operadores $\hat{S}_z$ y $\hat{S}_x$ no conmutan, no es posible disponer las partículas simultáneamente en los estados correspondientes a $\hat{S}_z$ y $\hat{S}_x$. Por ello los espines de las partículas que entran en el tercer imán corresponden a las que han sufrido deflexión hacia la izquierda o hacia la derecha con una probabilidad del 50 %, al actuar el campo magnético no uniforme aplicado en la dirección x. Ello implica que las partículas que entran en el tercer imán se encuentran en estados propios de $\hat{S}_x$, en lugar de estarlo en estado propios de $\hat{S}_z$, por lo que ahora sufrirán deflexiones hacia arriba o hacia abajo de nuevo, como ocurre con el campo magnético no uniforme original.

Cuando se trata de fotones, el experimento equivalente considera estados de polarización cuya dirección lineal se puede asimilar al espín de las partículas y el campo magnético no uniforme que provoca la deflexión en las últimas se corresponde con un desdoblador de haces de fotones que implica estado de fotones polarizados vertical u horizontalmente o formando ángulos de polarización de $\pm 45°$, equivalentes a la deflexión a izquierda y derecha del experimento de Stern-Gerlach cuando se aplica el campo magnético no uniforme según el eje x.

La criptografía es el arte de codificar un mensaje de forma que solamente lo puede leer el receptor. Tanto en ámbitos militares como gubernamentales o financieros es una herramienta ampliamente empleada. Se han utilizado métodos muy diversos para lograrlo. En la Segunda Guerra Mundial se empleó la codificación ENIGMA que usaba una máquina que producía un código sofisticado. Se han descubierto recientemente 16 máquinas de este tipo en el oficina del cuartel general del Ejército de Tierra, muy cerca de la plaza de Cibeles, en Madrid. Hoy se conoce que equipos británicos *craquearon* el código secreto alemán y tuvo gran incidencia este hecho en la finalización de la guerra. Un problema intrínseco de este tipo de encriptación es que siempre puede haber una copia del código o una máquina en manos de terceros interesados. Por ello se desarrollaron sistemas que emplean un código diferente en cada mensaje, como un código de un sólo uso.

Gilbert Vernam en la primera guerra mundial propuso que emisor y receptor compartieran un código, llamado clave, que consta de una secuencia al azar de dígitos binarios que tiene la misma longitud que el mensaje. El texto del mensaje se traduce a una variable binaria con un algoritmo conocido y se añade la clave para producir una nueva variable de bits que contiene el mensaje codificado. El receptor solo tiene que sustraer la clave del mensaje para recuperar el texto original. Así, para representar el alfabeto precisamos 5 bits, ya que las combinaciones con repetición de 2 elementos, 0 y 1, tomados de 5 en cinco son 32 y las de cuatro son 16, por tanto para codificar 27 letras (mayúsculas o minúsculas), necesitamos 5 bits. Elegimos la correspondencia por orden, es decir, A≡ 00001, b≡ 00010, C≡ 00011, hasta Z=11011. Supongamos que empleamos el proceso de encriptación módulo 2 y que la clave es "010111101100100"que acompaña al mensaje "11100101010001"¿Cuál es el contenido del mismo? Si efectuamos el descifrado obtenemos el mensaje "101011000110101"que se corresponde con SOS, si agrupamos de cinco en cinco los dígitos binarios para reconstruir la traducción a texto. Como la clave se genera al azar para cada mensaje, es única, pero es impracticable, porque emisor y receptor deben compartir la clave de cada mensaje, lo que implica la necesidad de transferencia segura de la clave y no hay procedimientos clásicos que lo garanticen. Solamente si toman contacto emisor y receptor es posible convenir la clave de forma segura, lo que valdría hasta una nueva reunión y tiene el flanco débil de que varios mensaje repetidos empleando la misma clave permite el análisis y la deducción del mecanismo de cifrado. Una alternativa es el empleo de una clave pública de encriptación. Ello conlleva el manejo, en realidad de dos claves, la pública y la privada. Esta última solamente la conoce el usuario, pero la pública la conoce cualquiera. Ahora el éxito se basa en la fortaleza de la función matemática para lograr invertir el mensaje. El usuario genera una clave privada que se emplea para calcular la clave pública que se difunde abiertamente y se emplea para encriptar los mensajes que se envían a ese usuario. La complejidad del proceso de encriptación hace que solamente sea posible descifrar los mensajes con la ayuda de la clave privada, pero al

conocerla solamente el usuario, es el único que puede invertir el proceso de encriptación.

Uno de los esquemas de encriptación muy conocidos es el denominado RSA. Su garantía descansa en el tiempo que se precisa para encontrar los factores primos de un entero grande, que aumenta exponencialmente con el número de dígitos. La clave pública es el producto de dos números primos que componen la clave privada, que solamente conoce el usuario. Si no se conocen esos dos números primos no se accede a la clave. La debilidad potencial es que no hay garantía absoluta de que no hay un algoritmo capaz de encontrar esos dos números primos de la clave. Si se dispone de ordenadores cuánticos la tarea es accesible. La encriptación RSA, la más extendida, es difícil de descifrar, pero no imposible.

La criptografía cuántica proporciona un método seguro con imposibilidad práctica de resultar descifrado por terceros. El hecho de partida es la debilidad de los mecanismos de clave pública. El futuro de la encriptación RSA llega hasta el momento en que se descubra un método eficiente para factorizar números primos. La alternativa es mucho más segura si no se emplean claves públicas sino privadas y conocidas solamente por los implicados. La encriptación cuántica tiene por objeto proporcionar un método fiable para transmitir la clave secreta sin riesgo de que nadie pueda interceptarla en el transporte. El método descansa en las leyes de la Física Cuántica y el proceso de compartir la clave secreta de forma segura es la llamada distribución de clave cuántica.

Se han desarrollado dos procedimientos para la criptografía cuántica. Uno de ellos supone la medida cuántica de particulas aisladas y el otro emplea los llamados estados entrelazados. El primero de ellos asume la existencia de tres caracteres: A, B y E iniciales de Alice, Bob y Eve que son las tres personas implicadas en la formulación tradicional de este tema, A y B en intercambiar información y E en interceptar el mensaje sin desvelar su presencia. La estrategia consiste en montar un dispositivo que permita detectar la actividad de E. La criptografía cuántica no defiende de ataques, sino que permite detectar cuando se interceptan. Si los implicados en la transferencia de la información detectan que se ha interceptado la transmisión, descartan los bits transferidos

mientras se ha interceptado. De esta forma se logra compartir una clave privada con la seguridad de no haber sido detectada y se puede usar con garantía para encriptar mensajes y transmitirlos a velocidad elevada por los canales públicos. Si emplean una clave para cada nuevo mensaje logran emplear un cifrador de un solo uso y el mensaje es seguro.

Si suponemos que el mensaje se envía mediante el empleo de pulsos de luz a través de una fibra óptica. Pulsos fuertes se codifican como 1 y pulsos débiles o ausencia de pulsos, como 0. En este caso A y B no tienen forma de identificar que E copia los datos mientras se transfieren, pues todo lo que tiene que hacer para interceptar la señal y copiarla es introducir en la fibra un desdoblador del haz 50:50 con un amplificador óptico y con una ganancia de 2, con lo que la señal que llega al receptor no se ve alterada. Esto es lo que ocurre en los sistemas convencionales en los que no hay ley física que evite la medida de una señal o hacer un duplicado sin afectar al proceso. Pero la Mecánica Cuántica nos ha introducido en la imposibilidad de efectuar una medida sobre una partícula aislada sin que se vea afectado su estado de alguna manera. No podemos detectar un fotón, extraer la información cuántica de él y transmitir otro fotón que tenga la misma información cuántica del primero y sea una copia exacta de aquél. No hay clonados cuánticos. En este caso extraer la información supone efectuar una medida sobre el sistema y si codificamos la información empleando una via mecanocuántica, la intercepción del mensaje tiene que revelar su presencia al ser un procedimiento invasivo la medida de las magnitudes cuánticas. Este es el principio en el que se basa la encriptación cuántica.

Supongamos que disponemos de un mecanismo diseñado para codificar la información mediante la medida de la polarización de un fotón aislado. El aparato dispone de un desdoblador de haces polarizados (PBS) y dos detectores de fotones aislados. Si el PBS tiene la propiedad de que transmite la luz polarizada verticalmente, pero la luz polarizada horizontalmente la transmite con un ángulo de 90 °. Este esquema es muy parecido al experimento de Stern-Gerlach, salvo que emplea los estados de polarización en lugar de los estados de espín. Supongamos que el fotón incidente está polarizado formando un ángulo, θ con respecto a la vertical.

Si $\theta = 0$ tenemos el fotón con polarización vertical y lo registrará un detector, mientras que si $\theta = 90°$ tendremos la luz polarizada horizontalmente y será el otro detector el que lo registre. Para cualquier otro ángulo, tendremos ciertas componentes horizontal y vertical. Si designamos los estados de polarización mediante $|\updownarrow\rangle$ y $\leftrightarrow\rangle$, para la polarización vertical y horizontal, respectivamente, el estado de un fotón cualquiera viene dado por

$$|P\rangle = \cos\theta|\updownarrow\rangle + \operatorname{sen}\theta|\leftrightarrow\rangle$$

y la probabilidad de que el fotón transmitido hacia el detector de la polarización vertical vendrá dada por

$$|P_{\updownarrow}|^2 = |\langle\updownarrow|P\rangle|^2 = \cos^2\theta$$

y la probabilidad de que el fotón se haya encaminado al detector situado a 90° es

$$|P_{\leftrightarrow}|^2 = |\langle\leftrightarrow|P\rangle|^2 = \operatorname{sen}^2\theta$$

Supongamos que queremos determinar θ y después transmitir otro fotón con el mismo ángulo de polarización. La intercepción supone efectuar el registro con los detectores vertical y horizontal, cuyas probabilidades correspondientes son $\cos^2\theta$ y $\operatorname{sen}^2\theta$, respectivamente. Si se registra en el vertical, el interceptador puede enviar un fotón polarizado verticalmente y en el otro caso hará lo mismo con el polarizado horizontalmente. Pero el estado del fotón enviado tras interceptar el primero, solamente lleva polarizaciones $\theta = 0$ o $\theta = 90°$, pero para los demás valores de θ la intercepción ha supuesto que la extracción de información ha supuesto que el fotón transmitido posteriormente tiene un ángulo de polarización diferente a la del original. No es posible extraer información de un sistema cuántico sin alterar su estado. Siempre que actuemos sobre un sistema cuántico, el hecho de la detección implica la alteración del estado y deja huella, independientemente del dispositivo que podamos idear, ya que se trata de propiedades fundamentales que no podemos soslayar.

El tratamiento de la interacción de los sistemas materiales y la radiación implica la superposición de los estados coherentes.

Aquí se contiene una diferencia fundamental con los sistemas clásicos y se justifica el diferente comportamiento de ambos. Un sistema cuántico apropiado es el representado en la Figura (5), que corresponde a un sistema de dos niveles de espín situado en un campo magnético. La función que representa al sistema viene dada por

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle \tag{6}$$

donde c_1 y c_2 son los coeficientes de amplitud de los dos estados implicados. Si efectuamos una medida obtendremos como resultado el nivel 1 con una probabilidad $|c_1|^2$ y el nivel 2 con una probabilidad $|c_2|^2$. Si consideramos un conjunto de N_0 partículas idénticas con dos niveles con N_1 partículas en el nivel 1 y N_2 en el 2 (como correspondería a un gas, por ejemplo) disponemos de una mezcla estadística. Haciendo

$$|c_1|^2 = \frac{N_1}{N_0}$$
$$|c_2|^2 = \frac{N_2}{N_0}$$

obtendríamos el mismo resultado que si efectuamos repetidas medidas en el sistema de N_0 partículas en el estado superposición dado por la Ecuación (6). La diferencia estriba en que el estado superposición es, en cierto sentido, simultáneamente el estado 1 y el estado 2 y esto provoca la posibilidad de una interferencia en la función de onda. En la mezcla estadística, por contra, una partícula dada está en el nivel 1 o en el nivel 2 y no puede darse la interferencia de la función de onda.

Vamos a considerar dos haces de luz de la misma frecuencia con fases ϕ_1 y ϕ_2 que solapan. El campo eléctrico resultante viene dado por

$$\begin{aligned}\mathcal{E} &= \mathcal{E}_1 e^{-i(\omega t+\phi_1)} + \mathcal{E}_2 e^{-i(\omega t+\phi_2)} \\ &= \mathcal{E}_1 e^{-i(\omega t+\phi_1)}\left(1 + \frac{\mathcal{E}_1}{\mathcal{E}_2} e^{-i(\phi_2-\phi_1)}\right)\end{aligned}$$

siendo ω la frecuencia angular y $\mathcal{E}_1$ y $\mathcal{E}_2$ las amplitudes de los dos campos eléctricos. Los dos haces interferirán si son coherentes, es

decir

$$\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1 = constante$$

en cualquier punto del espacio. Cuando las posiciones de los dos haces son tales que

$$\Delta\phi = 2n\pi$$

con n entero, tendremos una interferencia constructiva. En cambio, cuando las posiciones son tales que

$$\Delta\phi = (2n+1)\pi$$

tendremos una interferencia destructiva. Si las dos radiaciones son incoherentes, entonces las fases varían al azar, al igual que la variación de una con respecto a la otra, con lo que no hay interferencia, en cuyo caso tenemos

$$|\mathcal{E}|^2 = |\mathcal{E}_1|^2 + |\mathcal{E}_2|^2$$

Vemos la justificación de la introducción del término coherente en la descripción de superposición de estados. Si en el esquema de superposición de estados tomamos

$$c_1 \rightarrow \mathcal{E}_1 e^{-i\phi_1}$$
$$c_2 \rightarrow \mathcal{E}_2 e^{-i\phi_2}$$

la interferencia de las funciones de onda solamente puede darse cuando hay una relación de fase definida entre c_1 y c_2. Pero esto solamente ocurre cuando se trata de superposición de estados y no cuando hay mezcla estadística, ya que en este último caso la las funciones de onda tienen desfases al azar entre sí.

La matriz densidad se define a partir de las amplitudes de la función de onda, c_i incluyendo los elementos

$$\rho_{ij} = \langle c_i c_j^* \rangle$$

donde los subíndices i y j toman todos los valores posibles para incluir todos los estados cuánticos del sistema. Para un sistema de dos niveles la matriz densidad viene dada por

$$\underline{\underline{\rho}} = \begin{pmatrix} \langle |c_1|^2 \rangle & \langle c_1 c_2^* \rangle \\ \langle c_1^* c_2 \rangle & \langle |c_2|^2 \rangle \end{pmatrix}$$

La diferencia entre mezcla estadistica y superposición de estados se interpreta en términos de la matriz densidad por la presencia de los términos no diagonales, es decir ρ_{12} y ρ_{21}. En el caso de una mezcla estadística, los valores de las amplitudes son bien $c_1 = 1$ y $c_2 = 0$ o viceversa, pero los términos diagonales son nulos. Luego para un conjunto de estados de una mezcla estadística, la matriz densidad viene dada por

$$\underline{\underline{\rho}} = \begin{pmatrix} \frac{N_1}{N_0} & 0 \\ 0 & \frac{N_2}{N_0} \end{pmatrix}$$

En el caso de una superposición de estados las funciones de onda tienen ambos coeficientes no nulos, tanto c_1 como c_2 y los elementos no diagonales, ahora no son nulos y pasan a tener un papel central en la superposición de estados.

ESTADOS ENTRELAZADOS

El concepto de entrelazamiento o enredo es uno de los más contraintuitivos de la Mecánica Cuántica. En 1935 Einstein, Podolsky y Rosen (EPR) publicaron un trabajo sobre las propiedades de un sistema de dos partículas formadas en el decaimiento de una fuente radiactiva. Poco después Schrödinger acuño el término .[en]tanglement.[en] otro famoso trabajo sobre la paradoja del gato, que ha alimentado la imaginación de los estudiosos a partir de entonces.

En el trabajo de EPR se sugiere el experimento que incluimos en la Figura (9) Una fuente, (F) emite un par de fotones que arbitrariamente designamos por 1 y 2 que llevan direcciones diferentes. Medimos la polarización de cada fotón con un dispositivo

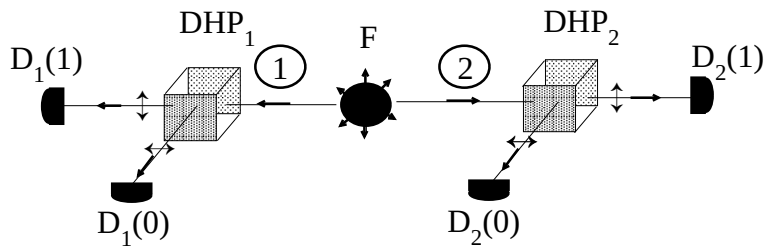

Figura 9 Experimento EPR

constituido por un desdoblador de haces(DHP_1 y DHP_2) y un detector para cada uno de los haces desdoblados (D_1 y D_2). Los estados de polarizacion $\updownarrow$ y $\leftrightarrow$ los denotamos como 1 y 0 ($|1\rangle$ y $|0\rangle$), que se corresponden con estados de polarización con ángulos de 0° y 90°, respectivamente.

Supongamos que la fuente emite un par de fotones correlacionados que gozan de las propiedades

- La polarización de los fotones 1 y 2 si se miden independientemente entre si están descritas al azar.
- La polarización del par de fotones está perfectamente correlacionada, lo que supone que

  Si se detecta $D_1(0)$ le corresponde $D_2(0)$
  Si se detecta $D_1(1)$ le corresponde $D_2(1)$

  Se puede alternativamente correlacionar cruzando las respuestas, de forma que

  Si se detecta $D_1(0)$ le corresponde $D_2(1)$
  Si se detecta $D_1(1)$ le corresponde $D_2(0)$

Cuando disponemos de un sistema multipartícula la descripción mediante estados entrelazados supone que la función de onda no puede ser factorizada como producto de las funciones de onda de

las partículas individuales. En el experimento que nos ocupa la función de onda es

$$|\Phi^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0_1, 0_2\rangle \pm |1_1, 1_2\rangle\right) \tag{7}$$

para el primer tipo de correlación, y

$$|\Phi^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0_1, 1_2\rangle \pm |1_1, 0_2\rangle\right) \tag{8}$$

para la correlación alternativa, donde los subíndices en las Ecuaciones (7 y (8) indican los fotones individuales. Estos son los denominados estados de Bell. La interpretación de la forma entrelazada de la función de onda implica que si efectuamos una medida de la polarización de un fotón, determinamos el resultado de la medida de polarización del otro fotón. Así en el ejemplo anterior en el caso de la Ecuación (7) podemos obtener el resultado (0,0) ó (1,1) con igual probabilidad. En el segundo caso obtendremos los resultados (0,1) o (1,0) con probabilidad del 50 % en cada caso. En ambos casos predecimos el resultado de la medida del otro fotón con certeza (100 %).

La paradoja del gato de Schrödinger ilustra el concepto de estados entrelazados con una analogía muy gráfica que, a diferencia del experimento EPR, es cruenta, aunque manejada conceptualmente, tan sólo, es suficiente. Se trata de disponer en una caja sellada un gato vivo junto con un átomo radiactivo. El decaimiento radiactivo del átomo es detectado por un contador geiger que activa un relé, que a su vez articula un martillo, que golpea a un tubo de ensayo sellado que contiene cianuro, por lo que al romperse el tubo de vidrio se libera el ácido cianídrico que mata al gato. El estado del gato está entrelazado con el del átomo. Si esperamos suficiente tiempo como para que la probabilidad de decaimiento del átomo sea del 50 %, la función de onda del sistema gato+átomo será de la forma

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\text{vivo}, 0\rangle + |\text{muerto}, 1\rangle\right)$$

donde $|0\rangle$ y $|1\rangle$, representan los estados sin decaimiento y con decaimiento del átomo, respectivamente. Esto indica que en la

caja tenemos un estado en el que el gato está al mismo tiempo vivo y muerto. Si abrimos la caja encontraremos al gato muerto o vivo con una probabilidad del 50 %.

Paradojas de estas no las encontramos en el mundo macroscópico, dado que los sistemas macroscópicos constan de muchas partículas que pierden la coherencia cuántica debido a las interacciones entre ellas. Pero a nivel microscópico y en sistemas aislados de fotones, átomos o moléuclas, las cosas son de otra forma. Los estados entrelazados de fotones se pueden obtener en el laboratorio. No está retringido el concepto solamente a los casos de dos partículas con su polarización y los fotones con momentos entrelazados se pueden generar también, incluso con más de dos partículas, aunque por simplicidad trataremos dos partículas. Un caso bien estudiado es el del átomo de calcio. El experimento

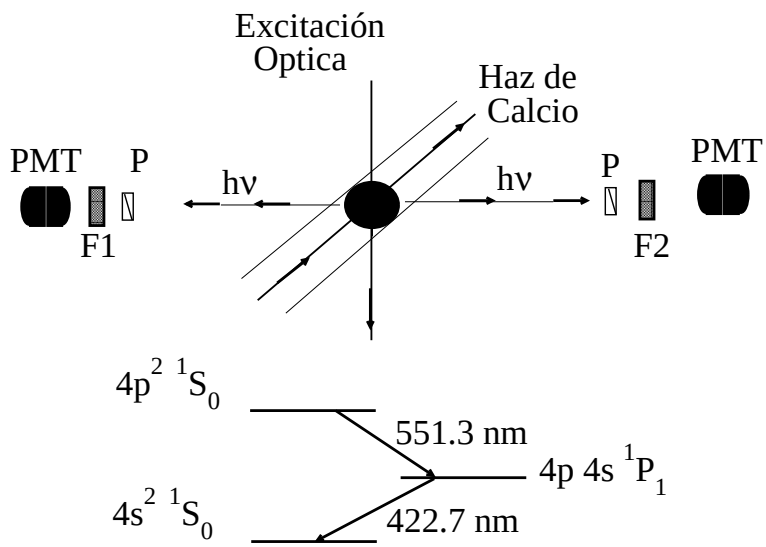

Figura 10 Generación de pares de fotones con correlación

captar los fotones emitidos en una cascada atómica desde el nivel $4p^2\ {}^1S_0$, en primer lugar al nivel 4s 4p ${}^1P_1$ y posteriormnente desde aquí hasta el nivel $4s^2\ {}^1S_0$. Estos dos saltos corresponden a transiciones permitidas de 551.3 nm y 422.7 nm, respectivamente. Situamos dos filtros de interferencia, designados por F1 y F2

antes de los fotomultiplicadores respectivos (PMT), de forma que seleccionamos los fotones de cada una de las longitudes de onda producidos en los dos saltos sucesivos. El proceso de excitación se ha logrado de diferentes formas: Kocher y Commins en 1967 ([36]) emplearon fotones ultravioleta producidos en una lámpara de hidrógeno con lo que accedieron al estado excitado 3d4p ^{1}P$_1$, desde donde decae espontáneamente al nivel 4p^2 ^{1}S$_0$. Aspect y col ([1]) lograron la excitacion directa empleando dos fotones de 406 nm y 581 nm procedentes de dos láseres. Los dos estados inicial y final de la cascada corresponden a $J = 0$, es decir, sin momento angular. Esto implica que los pares de fotones emitidos en cascada no pueden tener momento angular. Todavía más, la invarianza de los estados $J = 0$ y el que los estados inicial y final tengan la misma paridad obliga a que los fotones tengan la polarización correlacionada, como se requiere en los experimentos EPR. Los polarizadores lineales situados delante de los fotomultiplicadores corroboraron el hecho. La conclusión fue que las coincidencias solamente se daban cuando los ejes de los polarizadores se alineaban paralelos entre si, lo que ponia de manifiesto que se trataba de estados de Bell como los reflejados en la Ecuación (7).

En los años 80 y 90 se lograron nuevas fuentes de pares de fotones correlacionados empleando velocidades de flujo elevadas, obtenidas con técnicas de óptica no lineal. La técnica empleada se denominó proceso de conversión hacia descendente en la que se bombea con un solo fotón emitido por un láser con frecuencia angular ω_0 y se convierte en un par de fotones, señal e idler cuyas frecuencias angulares son ω_1 y ω_2, como se indica en la Figura (11)

donde se cumple

$$\omega_0 = \omega_1 + \omega_2 \tag{9}$$

y

$$\boldsymbol{k}_0 = \boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_2 \tag{10}$$

con lo que se garantiza que el haz incidente y los dos haces emergentes están en fase. A las Ecuaciones (9) y (10) se les denomina condiciones de coincidencia de fase. En el caso de que las frecuencias de los haces emergentes coincidan, $\omega_1 = \omega_2$, se dice que

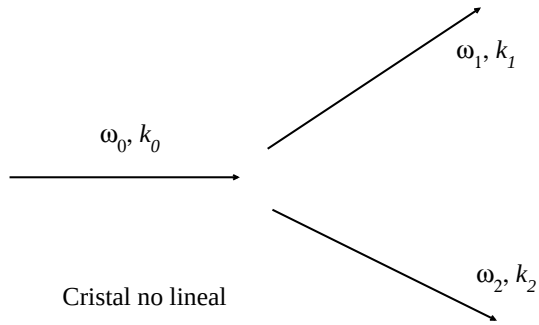

Figura 11 Proceso de conversión descendente con cristales de óptica no lineal

el proceso es degenerado y en los demás casos se denomina no degenerado.

No es fácil satisfacer las condiciones de coincidencia de fase, debido a que el índice de refracción de un material óptico no lineal, depende de la frecuencia, lo que supone diferentes dispersiones de los haces implicados, con lo que la satisfacción de las condiciones es compleja. Una propiedad adicional, cual es la birrefringencia, de la que están dotados los cristales no lineales, implica que el índice de refracción depende de la dirección de la polarización de la radiación con respecto a los ejes del cristal. Gracias a estos dos procesos combinados se puede balancear uno frente al otro y lograr dos tipos de coincidencia de fase: tipo-I que implica coincidencia de polarizaciones de los fotones producidos en la conversión descendente y que sean paralelas entre sí y ortogonales al fotón de bombeo y tipo-II en la que los fotones producidos en la coversión descendente tienen polarizaciones ortogonales. En la Figura (12) se ejemplifica la generación de pares de fotones con polarización enredada conseguidos en un proceso del tipo-II de coincidencia de fase realizado por Kwist y col ([2]). Se bombea un cristal de Borato bárico (BBO) con fotones UV procedentes de un láser y se obtienen dos fotones de frecuencia mitad. Los requerimientos de coincidencia de fase implican que los dos fotones de la conversión descendente emergen siguiendo conos de polarización opuesta que originan dos anillos que se intersectan. Pero si aplicamos la Ecuación (10 cuando encontremos

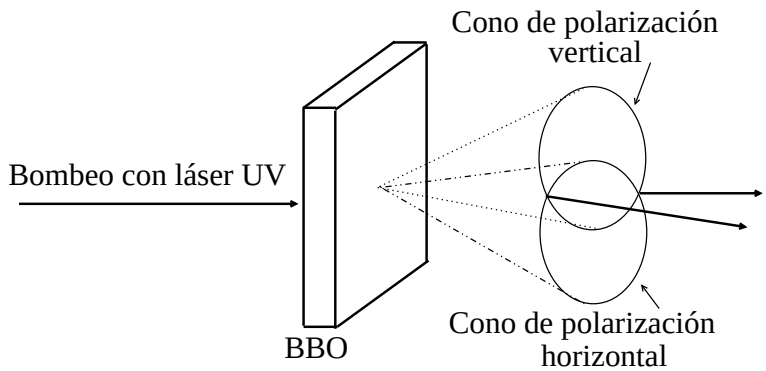

Figura 12 Generación de pares fotones de polarización entrelazada, mediante conversión descendente con coincidencia de fase tipo-II

un fotón polarizado verticalmente en una de las intersecciones, el fotón que encontraremos en la otra intersección debe estar polarizado horizontalmente y viceversa. Otra cosa es que el fotón en cada punto de intersección podría haberse originado en cualquiera de los dos anillos polarizados de forma opuesta y es igualmente probable que sea horizontal o vertical. Esto imnplica que se producen estados del tipo

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\leftrightarrow_1, \updownarrow_2\rangle + e^{i\phi}|\updownarrow_1, \leftrightarrow_2\rangle\right)$$

donde ϕ es la fase óptica que se puede alterar con placas de compensación. Si hacemos $\phi = 0$ ó π obtenemos los estados de Bell (8)

INTERFERENCIAS DE FOTONES ÚNICOS

Cuando en 1909 se llevó a cabo un experimento empleando una rendija de Young, se observó por primera vez una interferencia de un fotón único [37]. Usando pares de fotones correlacionados se puede demostrar la interferencia de un fotón único. el dispositivo experimental se presenta en la Figura (13) La señal y el idler con la misma polarización e igual frecuencia se generan mediante una conversión descendente degenerada de tipo-I,

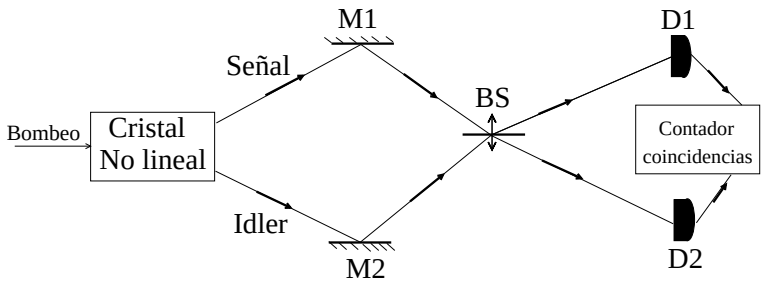

Figura 13 Interferencia de un fotón único a partir de un experimento con pares de fotones correlacionados. Interferómetro de Hong-Ou-Mandel [38]

empleando un cristal no lineal y se hacen interferir en un desdoblador de haz (BS) empleando dos espejos para enfocarlos, M1 y M2. Trasladando el desdoblador del haz hacia arriba o hacia abajo se compensan las diferencias de recorridos entre los dos haces que pudieran existir. Con haces clásicos observaríamos franjas brillantes y oscuras conforme desplazamos el desdoblador de haz. Las señales totales que llegan a los detectores (contadores de fotones) D1 y D2 son constantes, pero la magnitud de la señal oscila conforme trasladamos el desdoblador de haz.

¿Qué ocurre si llevamos a cabo el experimento con un solo haz? Si solamente hacemos incidir un fotón sobre el cristal no lineal, los haces de la señal y del idler están constituidos por una pareja de fotones correlacionados. Cuando el recorrido de ambos fotones es idéntico, los dos fotones alcanzan el desdoblador de haces al mismo tiempo e interfieren y cuando el desdoblador de haz es 50:50, la interferencia destructiva evita la posibilidad de que los dos fotones lleguen a diferentes puertas de salida y ambos fotones emergen por la misma salida. De este modo, los dos fotones llegan al mismo detector, D1 o D2, con lo que no hay coincidencia de eventos sobre los detectores. Hong y col [38] evidenciaron experimentalmente usando un láser de ion Argón que emite a 351.1 nm para bombear un cristal no lineal de fosfato diácido de potasio (KDP) que cuando hay coincidencia de los caminos recorridos por señal e idler no se detectan coincidencias y cuando la diferencia del camino recorrido por ambos supera la longitud de coheren-

cia no tienen lugar interferencias, en cuyo caso cada fotón sale al azar hacia cualquier puerta de salida produciendo coincidencias en D1 o en D2 para el 50 % de los eventos. Pero para diferencias de camino recorrido inferiores a la longitud de coherencia no se registran coincidencias, confirmando el efecto de interferencia de un fotón único.

Se han efectuado varios experimentos de interferencia incorporando varios cristales no lineales de conversión descendente, tratando de responder a la vieja cuestión de qué camino es el que corresponde al caso de que se trate de un sólo fotón y se ha evidenciado que cualquier intento de obtener información sobre el camino recorrido supone la desaparición del fenómeno de la interferencia. Esta cuestión se formuló en relación con los patrones de interferencia de doble rendija para partículas individuales, ya que en este caso la probabilidad de detectar la partícula en una posición dada es proporcional a la amplitud de la franja en cada punto. Cabe citar el trabajo de Zou y col [39] que emplearon un laser de bombeo de 351.1 nm generando señales idler a 788.7 nm y 632.8 nm y emplearon filtros de densidad neutra, pretendiendo que a cada detector solamente llegaran los fotones de la señal o del idler, confirmando que la inserción del filtro, evitaba cualquier interferencia demostrando que el intento de controlar por qué rendija pasaba el fotón destruía el efecto y se producía un patrón de probabilidad uniforme.

INTERFEROMETRÍA ATÓMICA

Históricamente las ondas de materia y su interferencia jugaron un papel determinante en la conformación de la Mecánica Cuántica. La formulación de las caracteísticas ondulatorias de la materia, propuesta por de Broglie [40] y la evidencia experimental demostrada por Davisson y Germer [8], la regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld y la Ecuación de Schrödinger, que explicaban la naturaleza discreta de la materia fueron los pasos decisivos para la comprensión de la estructura microscópica de los sistemas materiales.

Las interferencias de las ondas materiales, generalmente, implican microsistemas constituidos por partículas simples, átomos

y moléculas. Estos fenómenos de interferencia son usuales en física de colisiones (el efecto Ramsauer en colisiones electrónicas o la interferencia de simetría u-g en colisiones atómicas) y, recientemente, se ha usado en el control coherente de procesos atómicos, moleculares y reactivos.

Pero cabe una visión un poco diferente si entendemos la interferometría como la consecución artificial a escala macroscópica de interferencias onda-corpúsculo. Esto significa que asociadmos una onda al centro de masas o al movimiento externo de una partícula masiva y su evolución resulta controlable mediante dispositivos experimentales.

El experimento pionero es el relatado por Frisch y col.[41] con neutrones, aunque se considera que la interferometría atómica nació en 1950 con la interferometría electrónica [42]. La experiencia acumulada en este campo se plasma en las aplicaciones como la microscopía electrónica que ha alcanzado un elevado grado de sofisticación [43]. Unos 20 años después vió la luz la interferometría de neutrones que hacía uso de la difracción de Bragg por sucesivas capas de un cristal simple de silicio [44] y una alternativa fue la de neutrones con polarización de espín en un campo magnético [45, 46].

A partir de entonces se ha desarrollado un gran esfuerzo por extender la interferometría a átomos y moléculas. Se han tenido que superar aspectos fundamentales y prácticos, porque se trata de implicar a sistemas masivos y complejos con grados de libertad internos, por un lado y por otro porque dada la pequeñez de la longitud de onda de de Broglie implica una elevada sensibilidad y precisión. Además, en comparación con eletrones y neutrones, las moléculas y átomos presentan muchas dificultades experimentales que, en cierta medida, explican el por qué de la dilación en la aplicación de la interferometría a estos sistemas. En todo caso hay que superar problemas de todo tipo, desde las rendijas y redes de difracción a emplear, hasta las dificultades derivadas de la neutralidad electrónica de átomos, en comparación con los electrones y las dificultades para penetrar la materia densa, en relación con los neutrones y electrones. Quizás, a modo de compensación, los sistemas atómicos y moleculares presentan ventajas en lo que se refiere a su estructura y las interacciones que pueden tener lugar

con campos externos, tano eléctricos como magnéticos o electromagnéticos, lo que ofrece posibilidades de desarrollo y nuevos problemas y aplicaciones a sugerir. Sokolov [47] hizo uso del efecto Stark en átomos de hidrógeno metaestable para construir el primer interferómetro atómico, que fue único durante una década. En torno a 1980 se inició una actividad muy intensa estudiando los efectos mecánicos de la luz sobre los átomos [48, 49, 50, 51, 52].

La mayoría de experimentos hacen uso de haces atómicos o moleculares emitidos por una fuente que es un nozzle, un horno, un tubo de descarga, etc. que se coliman y se selecciona la velocidad. Una alternativa consiste en generar conjuntos de átomos enfriándolos y atrapándolos con una trampa magneto-óptica. Pero todos estos átomos son incoherentes al ser mutuamente independientes y sus funciones de onda tienen desfases entre sí dispuestas al azar. En el mismo sentido que se da en los interferómetros de luz que operan con fuentes ordinarias, cada átomo interfiere consigo mismo. El patrón de interferencia se construye átomo a átomo y por repetición de muchos ensayos que producen una señal proporcional al cuadrado de la función de onda promediado para todos los parámetros experimentales, como son la dirección y la magnitud de la velocidad. Una alternativa es realizar observaciones repetidas de un sistema simple, al igual que se hace con los fotones emitidos por la fluorescencia inducida por láser en un ión atrapado.

Cuando se trabaja con condensados de Bose-Einstein [21, 53, 22], todos los colectivos de átomos bosónicos condensados se sitúan en el estado fundamental en la trampa, que así logra que el condensado se convierta en una fuente totalmente coherente. Las interferencias, en este caso, se han conseguido mezclando dos condensados que inicialmente se sitúan en una doble trampa [54] y evidenciando que hay una diferencia de fase entre los dos condensados. Baudom y col [55] describieron los dispositivos experimentales usados y señalaron la progresión alcanzada en el estudio en las últimas décadas. Hay que destacar la importancia alcanzada por las diferentes técnicas, tanto las procedentes de la interferometría de la luz como nuevas y específicamente implementadas para átomos y moléculas [13, 56, 57, 58, 59]. Se han construido interferómetros cuyas aplicaciones destacan en campos como

el dominio de los fundamentos de la Mecánica Cuántica, metrología de constantes fundamentales, acelerometría, gravimetría y litografía a escala submicroscópica. La pequeñez de la lomngitud de onda de de Broglie juega un papel decisivo para abordar sistemas de mayor tamaño y es lógico esperar que la competencia se establezca entre la interferometría atómica y la interferometía lumínica en el rango de los rayos X. Las fuentes atómicas, incluyendo los átomos fríos son más fáciles de obtener y manejar que las fuentes de longitudes de onda corta como las de rayos X. Las perspectivas son halagüeñas, mejorando brillo y coherencia de las fuentes. Los condensados de Bose-Einstein permanecen más a escala demostrativa que aptos para emplear en interferometría, aunque es prometedora la consecución de haces de átomos coherentes a partir de condensados, a modo de láseres de átomos, que vendrían a suponer una mejora tan sustancial como lo ha sido la incorporación de los láseres a la interferometría de luz. No obstante, hay otros modos de conseguir haces de átomos coherentes, como por ejemplo, empleando átomos producidos en estados disociativos específicos de una molécula, o un cluster frío, en los que se logran correlaciones de pares, al modo en que se logran los fotones producidos en los procesos de conversión descendente en un cristal lineal

En la interferometría atómica hay planteado un problema teórico complicado relacionado con la coherencia. Al tratarse de ondas asociadas con movimientos externos de las particulas, es decir estados del continuo, se plantea el problema de ¿cuán satisfactoria es la descripción de las propiedades de coherencia del continuo? Porque para los estados discretos, la matriz densidad nos da la información que requerimos, pero para el continuo no está clara la descripción mediante un operador densidad. Esto pone de manifiesto la necesidad de un marco teórico ajustado al problema planteado, aún sin resolver definitivamente.

INTERFEROMETRÍA MOLECULAR

Las partículas más complejas que los átomos, como las moléculas o los clusters son muy interesantes, al objeto de analizar la incidencia de otros factores como la rotación-vibración, el efecto

de la quiralidad y aspectos fundamentales como la transición del comportamiento clásico al cuántico en función del tamaño molecular. Parece natural el tránsito a objetos materiales de tamaño creciente y reemplazar los átomos por las moléculas.

El tratamiento mecanocuántico del movimiento del centro de masas en sistemas cada vez más complejos es un tema importante en la Química Física moderna. Hay una gran abundancia de estudios teóricos de la transición desde los sistemas cuánticos a los regímenes clásicos, pasando por los mesoscópicos. Experimentalmente se ha dedicado mucho esfuerzo al control coherente y a la manipulación de las ocoordenadas espaciales externas de los sistemas complejos. La óptica de las ondas materiales y la interferometría se han extendido como hemos visto a átomos con variadas técnicas de manipulación coherente de los grados de libertad externos de los átomos, conformando un nuevo campo denominado óptica atómica [60, 61].

Se trata, pues, de extender las técnicas de la óptica atómica al dominio de las moléculas, que son sistemas caracterizados por estados cuánticos internos degenerados y no degenerados. Mientras que la coherencia de los estados internos en moléculas complejas se ha manejado desde hace tiempo en espectroscopía, tanto en el dominio de las frecuencias de radio [35], como en las frecuencias ópticas [62, 23], en la interferometría molecular es preciso manipular coherentemente el movimiento del centro de masas [63]. Chapman y col. [25] hicieron uso de un haz supersónico incidente de átomos de Na y dímeros Na_2 y aplicaron intensidades de luz resonantes para evitar selectivamente los átomos de Na y conseguir haces de dímeros (Na_2) puros. Emplearon nanoredes de difracción, en primer lugar para estudiar las características del haz molecular y en segundo lugar para construir un interferómetro con franjas de alto contraste. Finalmente, insertaron una célula de gas en uno de los recorridos del interferómetro y midieron el índice de refracción complejo para las ondas de de Broglie de Na_2 en gas Ne, lo que porporcionó nueva información de la parte de largo alcance del potencial $Na_2 \cdots Ne$. El haz de átomos de sodio y los dímeros se obtuvieron en una expansión supersónica, usando como gas portador argon o kripton. Calentando Na, cuya presión de vapor es ≈ 300 torr, en un reservorio a 800° lograron incremen-

tar la población de dímeros de sodio en el haz hasta en un 30 % de la intensidad del haz detectada. A una presión de gas portador de 200 torr con un nozzle de 70 μm obtuvieron un haz de Na_2 frío con tan sólo 3.5 % rms de dispersión longitudinal, lo que equivale a una temperatura translacional de 2 K. El haz molecular puro lo consiguieron empleando la presión de la luz al actuar sobre los átomos para lograr una deflexión de éstos fuera del haz colimado, como podemos ver en la Figura (14) El láser empleado para

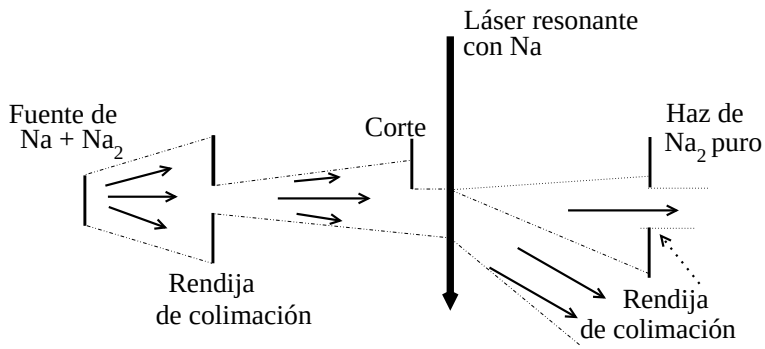

Figura 14 Obtención de haces de Na_2 puro a partir de mezclas Na + Na_2 según la referencia [25].

lograr la deflexión de los átomos de Na fue un láser de colorante sintonizado a la frecuencia de la transición $F = 2 \rightarrow F' = 3$ de la línea D_2 del Na, es decir a 589.0 nm. Mantuvieron la frecuencia a la resonancia libre de efecto Doppler y la frecuencia del láser sirvió para mantener un spot fluorescente centrado en el haz atómico antes de sobrepasar la primera rendija de colimación. Con un modulador electro-óptico generaron frecuencias con un offset de 1.713 GHz, para lograr la deflexión de los átomos en el estado hiperfino $F = 1$. La luz láser se aplicó a una posición centrada entre dos rendijas de colimación de 20 μm separadas 85 cm. Con esta geometría se requiere transferir $\approx 3\hbar k$ de momento angular transversal para lograr la deflexión de los átomos y arrojarlos fuera del haz. Se estableció un corte directamente sobre el haz antes de incidir el láser sobre él, con objeto de evitar que algunos átomos pudieran reflejarse fuera de la segunda rendija de colimación y fueran devueltos hacia atrás en la dirección del haz. Las mo-

léculas, Na_2, no están en resonancia con el haz láser, ya que la transición $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow A^1\Sigma_U^+$ al primer estado del dímero se sitúa en torno a 680 nm y, por tanto el láser que provoca la deflexión las deja inalteradas. Como los átomos de sodio y las moléculas se han producido por expansión supersónica, todos tienen la misma velocidad y su momento y , por tanto, sus longitudes de onda de de Broglie difieren en un factor de 2 debido, exclusivamente, a la diferencia de masas. Obtuvieron los patrones de difracción con redes de difracción de 100, 140 y 200 nm de periodo, que resultó ser una poderosa herramienta para analizar la presencia de átomos y moléculas en una expansión, al obtener la fracción media de moléculas y el centro y anchura de las distribuciones de velocidad para ambos a partir de los patrones de difracción. La ventaja de emplear la difracción para investigar los haces moleculares es que el procedimiento es no destructivo y se puede aplicar a sistemas débilmente enlazantes, como ocurre con el He_2 que se ha evidenciado su existencia como molécula por este procedimiento [14], revelándose como una poderosa herramienta para detectar cluster y moléculas de van der Waals.

El interferómetro de Chapman y col [25] se incluye en la Figura 15

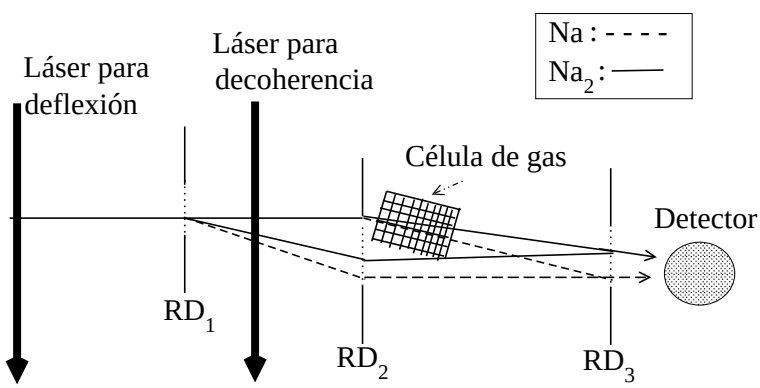

Figura 15 Interferómetro para detectar Na y Na_2 según [25].

y es un interferómetro del tipo Mach-Zehnder para moléculas y similar a los interferómetros atómicos. El periodo y la fase

del patrón de interferencia molecular es el mismo que el obervado para átomos incluso cuando las moléculas atraviesan el interferómetro por caminos diferents a los átomos, debido a que la geometría de la red de difracción produce un patrón de interferencia cuyo periodo y fase son independientes de la longitud de onda de de Broglie de la partícula. Es por ello que, además del láser que inicialmente para producir la deflexión y obtener haces de Na_2 puros, emplearon otro láser para introducir decoherencia para destruir la interferencia atómica mediante scattering resonante a partir del desdoblamiento de las funciones de onda atómicas en el interferómetro. De esta forma se asegura que la interferencia es debida exclusivamente a las moléculas.

No observaron degradación de la señal de interferencia molecular pese a la plétora de estados rovibracionales ligados de las moléculas. No es sorprendente el hecho, puesto que para dos moléculas muy próximas es muy improbable que tengan los mismos números cuánticos para ambos estados rovibracionales y la proyección del momento angular total no es importante, ya que en la interferencia de primer orden, que es la observada preferentemente en un interferómetro, solamente están implicadas las interferencias de cada partícula consigo misma. A la temperatura de trabajo, 300 K las energías de los fotones térmicos del fondo, exceden el espaciado de los niveles internos de las moléculas, que son del orden de ≈ 1 cm^{-1} para las rotaciones y del orden de ≈ 100 cm^{-1}, para las vibraciones, pero los efectos de decoherencia debidos a las transiciones entre los niveles vibracionales o rotacionales o emisiones espontáneas están minimizados, gracias a que las transiciones de dipolo eléctrico entre niveles robrivacionales del mismo estado electrónico no están permitidas en las moléculas diatómicas homonucleares [64, 65]. El scattering de las moléculas en las redes de difracción también podría originar transiciones rotacionales o vibracionales, ya que la velocidad del haz es de unos 1000 m/s y un espaciado de 200 nm en la red produce componentes de Fourier hasta de 5 GHz, lo que equivale a 0.17 cm^{-1}. Sin embargo, como esto es menor que la separación más pequeña entre niveles de rotación, ($\approx$) 2B, siendo B la constante rotacional, que en el caso de Na_2 supone una separación de 0.31 cm^{-1}. A su vez, las componentes de Fourier son menores que el

espaciado vibracional, que es de 159 cm^{-1}. Chapman y col. [25] no observaron ninguna reducción de contraste, indicando la ausencia de estas transiciones. Básicamente lograron la producción y difracción de un haz intenso de dímeros de sodio y demostraron que la difracción de un haz sodio supersónico sembrado por una red de transmisión, puede servir como una sonda intrínsecamente sensible de los constituyentes de un haz atómico. En el interferómetro de tres redes que construyeron para moléculas no observaron degradación en la señal de interferencia en comparación con los átomos. Esta interferometrís proporciona una nueva vía para estudiar la interacción de los estados fundamentales moleculares. La técnica puede usarse para investigar la polarizabilidad eléctrica de moléculas diatómicas y midiendo la diferencia de fase y estudiándola en función del campo eléctrico aplicado se puede determinar tanto la polarizabilidad perpendicular al eje molecular como la componente paralela. Otra aplicación experimental consiste en medir la interacción de una molécula polar con el campo electromagnético para investigar la decoherencia de los grados de libertad externos motivada por la interacción con un baño térmico.

La difracción simple se ha usado como un sistema de análisis de masas no destructivo y así se ha detectado el He_2 que forma clusters muy poco estables [14]. Los complejos de van der Waals He_n son candidatos especialmente adecuados para este tipo de aplicaciones. En el caso del He se han efectuado sofisticados cálculos teóricos [66, 67] que predicen un potencial He-He que soporta un estado ligado, débilmente ligado, con una energía de enlace de 0.11 μeV, lo que concuerda con el mejor potencial semiempírico [68] y los cálculos mecanocuánticos más precisos [69]. La primera evidencia experimental de la existencia del dímero de He, empleando un espectrómetro de masas es debida a Luo [70] en 1993. El experimento lo realizó a temperatura ambiente expandiendo al vacío gas He a una presión de 125 bar a través de un orificio pulsado de 0.15 mm de diámetro. Alcanzó velocidades terminales muy elevadas y una temperatura en la expansión de 10^{-3} K. Los dímeros los identificó mediante la dependencia cuadrática de la señal del espectrómetro de masas correspondiente a He_2^+ con la presión de la fuente. Los experimentos han sido discutidos por Meyer y col [71] debido a que Luo supone que la señal

medida para la masa de 8 uam (He_2^+), se debe exclusivamente a la ionización del He_2 y no contiene contribuciones de cluster de He más elevados y particularmente a He_3, pero en un espcetrómetro de masas la señal para 8 uam está dada por [72]

$$I_8 = \sigma_{ion}^{(2)} f_{22} \phi(He_2) + \sigma_{ion}^{(3)} f_{32} \phi(He_3) + \sigma_{ion}^{(4)} f_{42} \phi(He_4)$$

donde $\sigma_{ion}^{(N)}$ es la sección eficaz de ionización total de un cluster con N átomos, f_{NK} es la probabilidad normalizada $(\Sigma_K f_{NK} = 1)$ de producir un ión fragmento de He_K^+ y Φ es el flujo de cluster He_N. Las medidas efectuadas por Shollkopf y Toennies [72], haciendo uso de la nueva aproximación experimental consistente en el empleo de redes de transmisión para difractar los componentes del cluster de un haz criogénico, continuo y no pulsado, de He producido en la expansión a través de un orificio de 5 micras de diámetro. Como ya hemos señalado en el caso del Na_2 la técnica es enteramente no destructiva ya que solamente las partículas que pasan a través de las rendijas sin sufrir interacción con las barras pueden contribuir coherentemente al patrón de interferencia. El dispositivo es similar al de Chapman [25]. Como los cluster de haces moleculares tienen todos practicamente la misma velocidad [14], con distribuciones de velocidad muy estrechas, gozan de una coherencia temporal muy elevada. En estas condiciones la longitud de onda de de Broglie

$$\lambda = h/(N.m.v)$$

es inversamente proporcional al tamaño del cluster N. La condición de Fraunhofer para ángulos de difracción muy pequeños para las diferentes especies del haz se pueden aproximar por [72]

$$\vartheta \simeq \operatorname{sen} \vartheta = \pm n \frac{h}{Nmvd}$$

siendo m la masa del átomo de He, v la velocidad del haz (medida mediante las técnicas de tiempo de vuelo), d el periodo de la red de difracción y n el orden de difracción. A partir del ángulo de difracción para $n = 1$ se puede determinar el tamaño del cluster N. Los átomos y cluster difractados los detectaron con un ionizador de impacto electrónico sensible y un espectrómetro de masas.

El resultado experimental arrojó la cifra de muy pocas cuentas por segundo para la masa del He^+ y en torno a 35 cuentas por segundo para la masas del He_2^+.

Bordé y col [23] propusieron un interferómetro que empleaba cuatro láseres que se emplean dos a dos y que consiguen el desdoblamiento del haz molecular porque en una interacción resonante inteviene un fotón o hay implicado un proceso multifotónico. Se deriva una excitación simultánea de grados de libertad internos, que son los que generan los diferentes recorridos en el interferómetro y dan lugar a franjas de interferencia, incluso cuando los dos haces no se resuelven en el espacio. Solamente en el caso de haces moleculares muy lentos, que tienen longitudes de onda de de Broglie que coinciden con las longitudes ópticas, podría obtenerse resolución espacial. El dispositivo es muy similar al interferómetro de neutrones. En las condiciones de resonancia se satisface la condición de reflexión de Bragg

$$\boldsymbol{k} \cdot (\boldsymbol{p}_0 + \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{k}) = 0$$

siendo $\boldsymbol{p}_0$ el momento de las moléculas entrantes y $\boldsymbol{k}$ el vector de ondas del Hamiltoniano de interacción efectiva. Esta es la condición que corresponde al scattering elástico, en el que el módulo del momento es el mismo para los dos haces moleculares que salen del desdoblador del haz. En el caso de que no se satisfaga la condición de resonancia, los dos haces tienen un diferente módulo en la salida del desdoblador del haz, con una energía cinética extra proporcionada por la desintonización. La velocidad del haz se puede usar para variar la fase en uno de los brazos del interferómetro. Solamente cambiando la desintonización se pueden obtener franjas de interferencia, sin variar la inclinación con la que incide el láser. La molécula de I_2 se eligió en virtud de que el grupo de Bordé había trabajado con ella anteriormente, incluso detectando franjas de Ramsey [73]

Actualmente se reconocen los interferómetros de ondas de materia con desdobladores inducidos por luz, como técnicas de elevada precisión, ya que reducen de forma importante el ensanchamiento debido al tiempo de tránsito dominante en la observación de las transición entre niveles de tiempo de via grande y se

emplean para como discriminadores de frecuencia de elevada estabilidad, además de permitir escrudiñar aspectgos fundamentales experimentalmente. La mayor parte de los experimentos se han llevado a cabo con átomos, pero ya se ha iniciado el trabajo con moléculas donde los grados de libertad internos abren amplias posibilidades de manipulación de las ondas materiales. Como hemos señalado un paquete de ondas de una partícula en movimiento en un haz molecular se desdobla y luego se recombina a través de una serie de absorciones y emisiones estimuladas de cuatro fotones por átomos o molécula con una transición desde el estado fundamental $|f\rangle$ a un estado metaestable $|m\rangle$. La probabilidad de absorción y emisión estimulada se establece en el 50 % en cada zona de interacción, aplicando la intensidad apropiada de láser y el tiempo de interacción para satisfacer la condición $\pi/2$ para las oscilaciones de Rabi. La interacción produce superposiciones de los estados moleculares $|m/f, n\rangle$, donde n especifica el número de momentos de retroceso añadidos por la interacción del láser, que son del tipo

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|f,0\rangle + |m,1\rangle)e^{-i\Psi_L}\right)$$

donde la fase Ψ_L depende del láser. La transferencia implicada, de momento y de energía entre la partícula y el fotón, produce un desplazamiento de fase ϕ de los paquetes de onda, que intensifica el patrón del interferómetro que se puede monitorizar por la probabilidad P_m de observar a la salida del interferómetro una partícula en el estado excitado

$$P_m \propto \cos(\phi + \phi_L) = \cos(2D/v(\Delta \pm \delta) + \phi_L) \qquad (11)$$

donde $\phi_K = \sum \Psi_L$ denota la fase transferida del campo láser a la partícula en los procesos de absorción y emisión, v es la velocidad de la partícula, D es la distancia entre los haces láser que se co-propagan, Δ es la desintonización del láser con respecto a la frecuencia de transición ν_0 y $\delta = \hbar\mathbf{k}^2/2m$ el retroceso del fotón. La Ecuación (11) solamente se refiere a una clase de velocidad del conjunto. La presencia de una distribución de velocidad total da lugar a una superposición de varios interferogramas que están

en fase solamente cuando se cumple

$$\Delta \pm \delta = 0$$

A los interferómetros moleculares de I_2 [23] y de Schmiedmayer [74] se suma el de K_2 [24] que es fácil de utilizar en haces moleculares y que se pueden alcanzar los niveles electrónicos con láseres de diodo. Las perturbaciones muy débiles entre los estados $A^1\Sigma_u^+$ y el $b^3\Pi(O_u^+)$ de la molécula de K_2, caracterizadas con un interferómetro molecula,r abren la posibilidad de estudiar muchos otros casos moleculares con perturbaciones parecidas a los que se puede aplicar la metodología. Cualquier efecto que influya la evolución de las ondas de materia de forma distinta en dos estados cuánticos, provoca un desfase que se observa en el patrón de interferencia. Se puede analizar la influencia colisional sobre estados seleccionados de la molécula bajo estudio. En los haces supersónicos con siembra de gas, las velocidades relativas de colisión pueden ser del orden de 10 ms^{-1} que corresponden a energías translacionales de aproximadamente 1 K, lo que es una colisión fría. En estos experimentos las técnicas de modulación que simplifiquen los solapamientos de los multipletes hiperfinos son muy útiles. Pero, es más, se pueden sugerir nuevos experimentos manipulando los átomos que colisionan, por ejemplo, excitando los estados Rydberg y cambiando las interacciones de van der Waals, que son proporcionales a la polarizabilidad de las especies implicadas. Se puede, alternativamente, conectar y desconectar las colisiones entre átomos y moléculas en el haz, deflexionando los átomos fuera del haz mediante un láser resonante. Es particularmente interesante estudiar las colisiones que implican a las moléculas cerca del límite de disociación, accesibles desde el estado fundamental de la molécula, lo que puede proporcionar datos sobre colisiones de tres cuerpos, de gran interés en los conjuntos atómicos densos fríos [24].

INTERFERENCIA Y ESTRUCTURA MOLECULARES

Usualmente, el conocimiento que disponemos de la estructura molecular se basa en las espectroscopias de RMN, microon-

das, infraroja, visible, Raman, Rayos X y scattering de electrones. Pero todas estas técnicas de una forma u otra perturban al sistema y resultan inadecuadas cuando se trata de sistemas débilmente ligados con longitudes de scattering muy grandes. Los sistemas de van der Waals han recibido mucha atención en el pasado , especialmente tras la incorporación de las técnicas de haces supersónicos con los que se consigue eliminar prácticamente las interacciones y se consiguen temperaturas muy bajas congelando los estados energéticos internos [75, 76, 77] (y referencias incluidas). Recientemente, adquiere mayor protagonismo con la aparición en escena de los condensados de Bose-Einstein de gases a temperaturas ultrabajas [78]. La molécula de ^{4}He$_2$ es un bosón muy frágil. La pequeñísima energía de enlace, en torno a 10^{-7}eV, que es equivalente a 1 mK, ha hecho que se haya discutido durante mucho tiempo su existencia. En el momento actual la teoría predice que la molécula He-He solamente soporta un enlace en el estado fundamental [67]. La importancia del hecho es el conocimiento del potencial He-He,s de vital importancia para comprender las propiedades de superfluido del helio líquido. Pero el extremadamente débil potencial He-He incide en la molécula de ^{4}He$_3$ que se ha predicho que tiene un estado excitado de largo alcance [79]. La naturaleza de las mezclas de clusters ^{3}He/^{4}He [80, 81] depende del potencial, así como el cluster de He$_3$ débilmente ligado, para el que se han llegado a proponer hasta 30 átomos [82, 83]. Midiendo solamente los dímeros dispersados coherentemente que aumentan la intensidad de los picos de bajo orden en la difracción en una red de transmisión, [27], a partir de $\langle r \rangle$, determinado mecanocuánticamente a partir de la superficie de potencial y a partir de aqui determinaron la energía de enlace que fue de $|E_b| = 1.1 + 0.3/ - 0.2$ mK, que es la determinación más precisa en la actualidad. Los picos más intensos en la difracción son debidos a los átomos, mientras que los demás corresponden a ^{4}He$_N$. Como todos los cluster llevan la misma velocidad v que los átomos [84], la longitud de onda de de Broglie, λ, y por tanto sus ángulos de difracción, θ_n, de orden n son inversamente proporcionales a su masa, ya que $\operatorname{sen}\theta_n = n\lambda/d = nh/Nmvd$. La determinación del tamaño mediante redes de transmisión es apli-

cable a otras moléculas diatómicas o poliatómicas y a complejos de van der Waals.

INTERFERENCIA CUÁNTICA CON GRANDES MOLÉCULAS

Como hemos visto hay una incipiente aplicación efectiva de la interferometría molecular que ha permitido estudiar procesos cuánticos básicos de los efectos onda-partícula y efectuar aplicaciones en medidas de alta precisión de fuerzas inerciales [85, 86] y constantes fundamentales [87].

El estudio de la decoherencia térmica mediante el acoplamiento al entorno permite obtener información de numerosas propiedades moleculares y trabajar en nuevas aplicaciones, por ejemplo, litográficas o metrológícas [88]. Brezger y col. [89] construyeron un interferómetro para macromoléculas, aplicándolo a las moléculas de fullereno, C_{70}, poseedoras de muchos grados de libertad rotacional y vibracional. Los interferómetros anteriormente descritos: el de Ramsey-Bordé, aplicado a la molécula de I_2 [23] o el de titpo Mach-Znehder aplicado a la molécula de Na_2 [25] requieren superar problemas de envergadura. En el primero de ellos, la dificultad es la falta de transiciones resonantes estrechas y en el segundo se requieren redes extremadamente finas, excelentes colimaciones o grandes distancias. La razón es que estos interferómetros operan en regimen de Fraunhofer, en el que la caracterización del tamaño de un patrón de difracción se comporta linealmente tanto con la longitud de onda como con la distancia entre la estructura de difracción y el plano de observación. Una solución es emplear un interferómetro Talbot-Lau, en el que se emplean tres redes sucesivas, aunque opera en régimen de Fresnel en el que el tamaño del patrón de difracción es función de la raíz cuadrada de la longitud de onda y de la distancia. La ventaja es que no necesita colimacion, dado que acepta haces con incoherencia espacial. Esto hace que los contajes de un interferómetro de Talbot-Lau pueden superar en varios órdenes de magnitud a los interferómetros de Mach-Zehnder. Se ha empleado en el interferómetro con átomos de potasio [90] y para átomos de sodio

en un condensado de Bose-Einstein [91]. Dado que el escalado de las propiedades de los dispositivos de campo cercano son muy favorables en comparación con los interferómetros de campo lejano, el efecto Talbot-Lau se ha llegado a proponer, incluso para estudiar objetos cuánticos del tamaño de los virus [88, 26].

El efecto Talbot es un fenómeno de autoimagen que acontece cuando una estructura periódica se ilumina con un haz coherente [92, 25, 93]. Las imágenes de esta red se reconstruyen a múltiplos discretos de la longitud de Talbot, $L_T = d^2/\lambda_{\mathrm{dB}}$, siendo d una constante de la red y λ_{textdB} es la longitud de onda de de Broglie del objeto incidente. Brezgher y col. [89] han propuesto un interferómetro de este tipo con tres redes idénticas e igualmente espaciadas, la primera de ellas actuando como una combinación de fuentes que tienen una coherencia mutua nula. Cada una de estas fuentes es suficientemente pequeña como para preparar la coherencia transversal requerida por la segunda red. Las imágenes que provienen de las diferentes fuentes parecen idénticas salvo que están desplazadas por múltiplos de la constante de la red y por tanto solapan pese a la falta de coherencia mutua [93]. La tercera red que es movible bloquea o transmite la interferencia molecular de acuerdo con su posición.

En determinadas circunstancias se obtiene un patrón de interferencia cuando se usa una partícula pesada y se envía a una rendija una a una. Cada vez que impacta en el detector se trata de una sola partícula, pero no podemos calcular la posición en la que va a impactar, ya que el proceso está gobernado por el azar. Así pues, el experimento de la doble ventana con partículas únicas nos enfrenta a varias cuestiones:

- ¿Cómo puede ser que una partícula única, que observamos tanto en la fuente como en el detector estando, por tanto, bien localizada y siendo mucho más pequeña que la abertura practicada en la barrera, adquiere información sobre el estado (abierto o cerrado) de una abertura remota, si solamente podemos considerar que la relación con la abertura es que pasó a través de ella?

- ¿Cómo es posible que no podamos establecer la posición de la partícula sin destruir su naturaleza ondulatoria?

- ¿Cómo se puede comprender la aparición de un patrón de interferencia en contraste con el impacto puntual al azar de una partícula única si ninguna de las partículas puede interactuar con las demás bajo ninguna forma conocida?

La interferometría de doble rendija encierra muchos aspectos fundamentales. Tratemeos en primera instancia de reflexionar acerca de la complementariedad entre lo que conocemos de la posición de la partícula y la visibilidad en el interferograma. Si solamente consideramos una rendija, la partícula debe pasar a su través y el patrón de interferencia debe desaparecer. La interferencia perfecta solamente podemos obtenerla si abrimos la segunda rendija y si excluimos la opción de detectarla, incluso el recorrido que ha seguido. La dualidad onda-corpúsculo establece que la descripción de una partícula sugiere la descripción local en la fuente y en la pantalla, pero un modelo ondulatorio para la propagación que no observamos. Esta propagación es la que describimos mediante una superposición de estados, en concreto estados de posición que son mutuamente excluyentes. Un objeto clásico tomará uno u otro recorrido, mientras que un objeto cuántico no se puede decir que es lo que hace. La información que contiene un sistema cuántico es insuficiente para que sea posible tal descripción [94]. El patrón que se plasma en la pantalla está bien determinado para el conjunto, pero la detección puntual de una partícula concreta es impredecible en cualquier experimento. Nos tenemos que conformar con la posibilidad de que una partícula alcance una posición, más que tener una posición concreta. Todo esto es lo que llevó a Feynman a emfatizar que el experimento de la doble rendija está en el corazón de la Mecánica Cuántica [95] porque "*In reality, it contains the only mystery, the basic peculiarities of all quantum mechanics*". Quizás, se puede pensar que falta otro de los grandes temas centrales de la Física Cuántica, que son los denominados estados entrelazados, pero se convierten en un ingrediente esencial si consideramos cómo difundimos cada partícula, es decir si requerimos información sobre el camino seguido a través del entorno, fenómeno que supone pérdida de coherencia entre los recorridos vecinos en el experimento de la doble rendija.

La molécula de fullereno C_{60}, descubierto en 1985 [96], es una estructura especialmente estable y abundante cuando está constituida por 60 carbonos adoptando la forma de un balón de fútbol. Son suficientemente grandes como para tener el atractivo de ser objetos, al menos mesoscópicos y tener propiedades más próximas a un trozo de material sólido que a átomos frios, que son los que se han utilizado en los experimentos de interferencia de ondas. La existencia de estados colectivos de muchas partículas como plasmones y excitones, la gran variedad de modos de vibración y rotación, incluso el concepto de temperatura molecular interna, son algunos de los elementos distintivos de un colectivo como el que compone los fullerenos. Es todo un reto intentar detectar un comportamiento ondulatorio del centro de masas de un objeto de estas características.

Nairz y col [28] construyeron un experimento muy parecido al de la doble rendija de Young, con sus cuatro partes: fuente, colimador, red de difracción y detector, como podemos ver en le Figura (16)

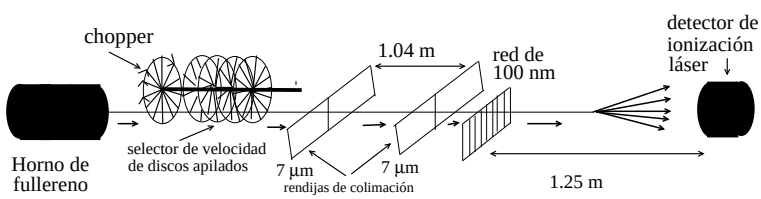

Figura 16 Interferómetro para fullereno [28].

El polvo de fullereno se sublima en un horno cerámico a una temperatura de unos 900 K. La presión de vapor es suficiente para eyectar moléculas en una secuencia estadística, una a una, a través del orificio practicado en el horno. La velocidad más probable de las moléculas es de $v_m = 200m/s$ y una dispersión de velocidad térmica ($\Delta v/v_m = 60\,\%$, siendo Δv la anchura total de la distribución a mitad de la altura. La longitud de onda de de Broglie

viene dada por $\lambda = h/mv$, que para la molécula de fullereno con una masa $m = 1.2\ 10{-}24$ kg le corresponde $\lambda = 2.8$ pm. El diámetro del fullereno es aproximadamente 1 nm, con lo que es unas 350 veces mayor que la longitud de onda de de Broglie y la interferencia tendrá un tamaño realmente pequeño. Emplearon como elemento de difracción una red de SiN con una constante nominal de red, es decir periodo, de $d = 100$ nm, aperturas de rendija de 55$\pm$5 nm y espesor de 200 nm según la trayectoria del haz. El ángulo de deflexión de la difracción de primer orden, haciendo uso de la aproximación de ángulos pequeños, viene dado por la relación entre la longitud de onda y la constante de la red, es decir

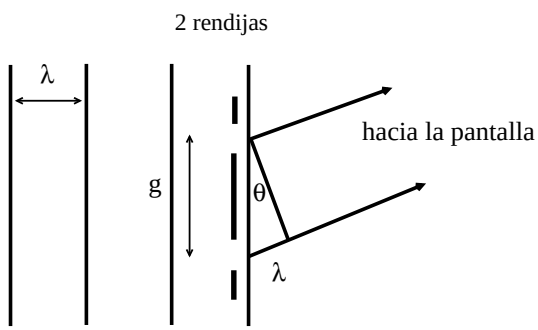

Figura 17 Difracción en una doble rendija.

En un dispositivo de doble rendija, la máxima interferencia de primer orden de una onda monocromática está determinada por la interferencia constructiva de las ondas que se producen en las dos ventanas vecinas. La diferencia de la longitud de los recorridos de las dos ondas es igual a la longitud de onda de de Broglie. Las interferencias de orden elevado derivan de la limitada coherencia longitudinal en una fuente térmica. La selección de velocidad en los experimentos de interferencia aumenta la longitud de coherencia longitudinal y permite la observación de las franjas de interferencia de orden elevado.

La distribución molecular a campo lejano se observa empleando un detector de ionización láser de barrido. Al situar el detector

distaciado de la red de difracción, 1.25 m, la separación entre los picos de interferencia, cuando alcanzan el detector es de

$$L \times \theta = 1.2\,\mathrm{m} \times 28\,\mu\mathrm{rad} = 34\,\mu\mathrm{m}$$

y dado que el espaciado entre los diferentes órdenes de interferencia es muy pequeño, se requiere una resolución espacial elevada en el detector. Se empleó un láser verde de onda continua (CW) con una potencia de 25 W y focalizado con una anchura de haz de 4 μm y aplicado ortogonalmente al haz molecular. Todas las moléculas que pasan a través del láser a, o muy próximas al foco, se calientan a una temperatura interna que excede los 3000 K y se ionizan. Los iones de fullereno positivos resultan acelerados hacia el electrodo a 10 kV, donde inducen la emisión de electrones, que a su vez se multiplican y los pulsos de carga que generan son los que se cuentan. La eficiencia de la detección fue de un 10 % y, de esta forma, se alcanzaron dos órdenes de magnitud superior a la ionización por bombardeo de un haz de electrones que se suele emplear usualmente. Con una elevada focalización del haz láser se consiguió una anchura efectiva del detector de unos 8 μm, lo que permitió resolver los órdenes de difracción individuales. El registro del patrón de difracción se consigue barriendo con el láser el haz molecular en pasos de 2 μm, con lo que el interferograma muestra el contaje de las moléculas en función de la posición transversal del láser.

INTERFERENCIA Y COHERENCIA

Como ya hemos apuntado, coherencia significa que hay una relación de fase constante y bien definida en el tiempo y en el espacio entre dos o más frentes de onda. La coherencia espacial, es decir transversal, de una fuente, generalmente un horno, es insignificante justamente delante de ella. Dentro de la fuente la anchura de la coherencia es solamente del orden de la longitud de onda de de Broglie térmica. Como ocurre con las fuentes de emisores sin correlación, la visibilidad es muy reducida por el hecho de que hay muchos interferómetros parciales, cada uno de los cuales parte de un punto diferente de la fuente y forma dos trayectorias

a través de la doble rendija y dirigiéndose hacia un punto en el detector, con lo que adquieren diferentes diferencias de fase conforme recorren el camino a un punto de la pantalla.

Es por ello que, tras el horno, es preciso aumentar la anchura de coherencia espacial unos cuantos órdenes de magnitud con objeto de iluminar, al menos, dos rendijas vecinas coherentemente [28]. La coherencia espacial está determinada, esencialmente, por la geometría del experimento y aumenta linealmente, en buena aproximación, al aumentar la distancia de la fuente y con la disminución del tamaño de la primera rendija de colimación. Esta regla general para la influencia de los elementos de colimación en la coherencia transversal se conoce como teorema de Cittert-Zernicke [97, 98, 99], según la cual la función de coherencia espacial se puede deducir de las curvas de difracción, que están determinadas por las aberturas según el haz molecular. El elemento limitante suele ser la rendija de colimación.

La ganancia de coherencia supone una caída importante de la velocidad de conteo, dado que la señal decrece cuadráticamente con la distancia a la fuente y linealmente con el tamaño de la rendija. Aunque la primera rendija de colimación ya proporciona coherencia, Nairz y col. [28] introdujeron una segunda de 7 μm de anchura y situada aproximadamente a 1 m de la primera rendija. De esta forma consiguen un haz colimado con una anchura significativamente menor que la separación entre los diferentes órdenes de las redes de difracción, con objeto de resolver con claridad los picos de difracción.

La coherencia espectral de la fuente juega también un papel importante, dado que las moléculas con diferentes velocidades y, por tanto, diferentes longitudes de onda, siguen diferentes ángulos de difracción. Dado que el detector registra la suma las imágenes de difracción amplificadas y comprimidas, el patrón de interferencia resultaría debilitado. En contraste con la contribución espacial, no hay ganancia en la coherencia longitudinal (espectral) durante el vuelo libre, debido al hecho de que las diferentes clases de velocidad evolucionan de forma distinta. En un experimento de haces pulsados se podría observar un paquete agudo, esto es, un paquete de ondas con longitudes de onda más cortas en el pulso de cabecera y longitudes de onda más largas en la cola.

La coherencia espectral no mejora durante la propagación debido a la reestructuración interna del paquete de ondas, aún cuando la descripción de un haz pulsado con paquetes de onda es problemática, ya que aquél implica una estructura de fase interna bien definida. Más concretamente, un paquete de ondas está caracterizado por una relación de fase bien definida entre las diferentes componentes de Fourier del haz. Tal relación se puede imponer solamente mediante una adecuada preparación, que puede ser un tiempo bien definido al cual comienza el paquete de ondas. Cuando no se hace esto, el haz es estadístico y, por tanto incoherente, constituido por una mezcla de varios momentos. Un haz se puede caracterizar operativamente mediante la longitud de coherencia, dada por

$$L_c = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda} = \frac{\lambda v}{\Delta v}$$

que es la longitud que mide la caída de la visibilidad de una interferencia, cuando aumenta la diferencia entre dos recorridos que interfieren. Esto quiere decir, que como un haz térmico tiene $\Delta v/v \approx 0.6$

$$L_c = \frac{\lambda v}{\Delta v} \approx \lambda \cdot 1.7$$

garantiza la existencia de franjas de interferencia de primer orden. No obstante se puede mejorar la puerza espectral con la introducción de filtros de velocidad, como se indica en el esquema de la Figura (16). Un haz térmico produce, pues, unas franjas de interferencia limitadas al primer orden, que se concretan en picos a ambos lados del pico central cuando se representa la cuenta del detector frente a la posición. La razón de la ausencia de los picos de órdendes de interferencia elevados, es la pobre coherencia espectral. Para ver mayor número de franjas hay que aumentar la longitud de coherencia y, por tanto disminuir la dispersión de la velocidad. Se consigue con selectores mecánicos de velocidad (16), compuestos por discos que giran en torno a un eje común. El haz molecular choca con el primer disco y solamente pasan las moléculas que recorren la distancia de un disco al siguiente en el mismo tiempo que invierten los discos en hacer girar la

ventana abierta hasta la siguiente. Puede bastar con dos de tales discos, aunque si se incluyen más se puede eliminar la dispersión de la velocidad e incluso eliminar las velocidades producidas en los bordes. Simplemente, variando la velocidad de giro se ajusta la velocidad de las moléculas transmitidas. El chopper que precede a los discos de velocidad, se incluye al salir de la fuente, [28], con objeto de medir la distribución de tiempo de vuelo con lo que se retienen las moléculas que no satisfacen la condición. Así pues, con el selector de velocidad se estreha la distribución y la velocidad media se puede centrar. Si la velocidad media es de 120 m/s. la longitud de onda de de Broglie es de 4.6 pm. Aumentar la longitud de onda supone una mayor separación de los picos de difracción, lo que clarifica las franjas de interferencia.

Los patrones de difracción se pueden comprender cuantitativamente haciendo uso de la aproximación de Fraunhofer de la teoría de difracción de Kirchhoff, pero supone no considerar un elemento importante en los experimentos con ondas materiales y redes de difracción como es la interacción atractiva entre moléculas y paredes, que traen como consecuencia una fase adicional en la función de onda molecular, tras pasar la molécula a través de rendijas [100]. El efecto cualitativo de esta fuerza atractiva supone un estrechamiento de la anchura real de la rendija, introduciendo una anchura de rendija efectiva. En el caso de moléculas grandes puede ser importante, en el caso del fullereno llega hasta 20 nm [28],, cuando se trata de haces moleculares sin selección de velocidad y hasta 30 nm cuando son haces con selección de velocidad. El efecto es más intenso para las moléculas más lentas, dado que la interacción con la pared tiene mayor duración. Es preciso una descripción completa para disponer de una función de transmisión, que implica la modulación dependiente de la posición tanto de la amplitud como de las fase moleculares.

INTERFERENCIAS CON PARTÍCULAS INDIVIDUALIZADAS

Los patrones de interferencia e obtienen a partir de partículas simples, separadas, únicas, individuales. No hay interferencia en-

tre dos o más partículas durante su evolución en los aparatos de interferencia. El argumento para evidenciar que las interferencias son de partículas se basa en la separación espacial entre las moléculas. Un flujo molecular con una velocidad media de 200 m/s, es de $\approx 3 \times 10^9$ cm$^{-2}s^{-1}$ en el plano de detección, a lo que corresponde una densidad molecular de 1.7×10^{11} m^{-3} o una distancia molecular media de 200 μm. Esto supone que es mayor que tres órdenes de magnitud más amplia que cuanlquier rango molecular realista de fuerzas de van der Waals, que operan tipicamente a varias centenas de nanometros.

Otro argumento a favor de las interferencias individualizadas es que solamente ocurren entre estados indistinguibles. Sin embargo, todas las moléculas se pueden considerar como estando en estados diferentes. Una molécula como el fullereno tiene 174 modos vibracionales diferentes y los modos rotacionales pueden poblarse a energías diferentes. Por tanto, la probabilidad de que dos moléculas sucesivas estén exactamente en el mismo estado con todos los estados internos iguales, simplemente es insignificantemente pequeña. Para otros tamaños moleculares el problema es considerablemente diferente, aunque la distribución rotacional ya supone una dispersión de estados suficiente como para hacer muy probable el que dos moléculas sucesivas puedan pertenecer a estados distintos pero, en todo caso, en moléculas grandes, con mayor razón la interacción tiene lugar preferentemente con particulas individualizadas.

INFORMACIÓN SOBRE EL RECORRIDO

Si pretendemos localizar a una partícula mientras pasa a través de una de las dos rendijas, podemos pensar que bloqueando una de ellas, lo podemos conseguir. Pero lo que ocurre cuando se bloquea una de las rendijas es que el patrón de interferencia desaparece. Esta regla sigue siendo válida si no bloqueamos la rendija, pero pretendemos obtener información, digamos por ejemplo por la via de emplear la dispersión de fotones o los fotones emitidos por las moléculas, cosa perfectamente posible, al contrario de lo que ocurre cuando se trata de experimentos con electrones, neutrones y átomos, [101, 102] sin necesidad de ninguna excitación

externa. La razón reside en que las moléculas almacenan suficiente energía térmica cuando abandonan el horno donde se generan los haces moleculares y si aplicamos la regla de Bohr, el patrón de interferencia debe desaparecer si las moléculas emiten un fotón con una longitud de onda suficientemente corta, de forma que permita al experimentador medir la posición de la molécula emisora con suficiente precisión. De acuerdo con la teoría de Abbe del microscopio, el fotón tendrá una longitud de onda menor que dos veces la distancia entre las dos rendijas.

En moléculas grandes la longitud de onda de los fotones emitidos más probables es 100 veces mayor que la separación entre dos rendijas vecinas [28] y el número de cuantos emitidos al entorno es suficientemente pequeño (uno o unos pocos) y no perturban la detección de la interferencia. Por tanto, incluso si la molécula emite uno o unos cuantos fotones que dan información sobre el camino seguido desde la fuente al detector, esos fotones no se pueden emplear para determinar el recorrido. El estado del fotón y el estado de la molécula no están entrelazados porque los dos posibles estados que emiten fotones que informan de cualquier recorrido solapan y esto supone que la molécula no tiene memoria del camino en el que se ha dado la emisión.

AGOTAMIENTO DE HACES MOLECULARES POR CAMPOS ELÉCTRICOS HOMOGÉNEOS Y OSCILANTES

Estudiando la dinámica de un sistema de una partícula que posee momento angular interno al aplicarle un par con una componente perpendicular al vector momento angular [103] se observó que la trayectoria resultaba modificada. Se sugería un experimento con un sistema microscópico en el que se hiciera interaccionar un campo magnético homogéneo y una radiación electromagnética con una particula que poseyera espín y momento magnético, formulando la hipótesis de que se produciría una desviación de la trayectoria original cuando la radiación fuera resonante con una transición entre niveles de la partícula. La sugerencia la recogió González Ureña [29] y col. y efectuó un experimento con un haz supersónico de N_2O que interactuaba con un campo DC Stark ho-

mogéneo y una radiación de radiofrecuencias resonante. El campo eléctrico Stark reemplazaba al Zeemann y el momento eléctrico dipolar de una molécula lineal como N_2O, al momento magnético.

En los experimentos de resonancia eléctrica de espectroscopía de radiofrecuencias se utilizan moléculas lineales con momento dipolar que se hacen pasar a través de dos campos eléctricos no homogéneos que refocalizan las moléculas en un estado rotacional y en un estado concreto de cuantización espacial a un detector. Entre los dos campos eléctricos se sitúa un campo eléctrico homogéneo que se superpone a un campo eléctrico oscilante. Seleccionando los parámetros de los campos eléctrícos estático y oscilante se pueden provocar tránsitos entre niveles de energía y, de esta forma, no vuelven a focalizarse en sus antiguas trayectorias. Al hacer pasar a través de estos campos haces moleculares se observan cambios en la intensidad del haz cuando se superpone el campo eléctrico oscilante al campo estático, que se concretan en una depresión del haz. En la Figura (18) se incluye un esquema del montaje experimental que se empleó con N_2O.

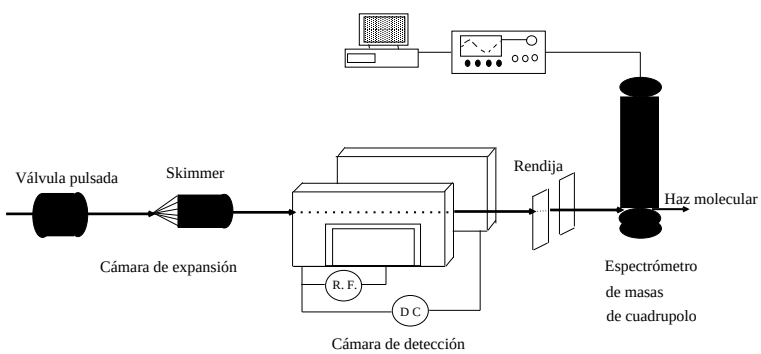

Figura 18 Medida de la depresión de la señal de N_2O [29].

el haz molecular supersónico de N_2O sembrado en He se inicia en una válvula pulsada y tras pasar a través de un skimmer ingresa en la cámara de detección donde se sitúa una unidad de dos campos eléctricos y frente al detector, que es un espectrómetro de masas de cuadrupolo, entre los que se sitúa una rendija y solamente las

moléculas que no sufren deflexión son las que alcanzan el detector. El haz molecular se desplaza a una velocidad dada conseguida en la expansión supersónica e ingresa en la región del campo eléctrico homogéneo. Como consecuencia de la interacción con el campo, los niveles de energía se desdoblan por el efecto Stark. Se aplica entonces, una radiación electromagnética perpendicular al campo eléctrico estático, que puede ser resonante con la transición entre los niveles desdoblados. Los dos campos son perpendiculares entre sí y el campo estático es, a su vez, perpendicular al desplazamiento del haz molecular. Esta disposición asegura una componente no nula con respecto al momento angular rotacional molecular, al tiempo que solamente permite controlar la intensidad del haz transmitida, lo que se hace en función de la frecuencia del campo oscilante, buscando la depresión del haz para un valor del campo Stark concreta. La señal se integra para el pulso del haz molecular controlado por el espectrómetro de masas sintonizado a 44 uam. Se mantienen constantes las intensidades tanto del campo oscilante como del estático. Se seleccionó la transición

$$(J, M) = (1, \pm 1) \rightarrow (1, 0)$$

dado que la temperatura rotacional de las moléculas en el haz molecular son bajas. Se observa una depresión de la intensidad del haz molecular de N_2O para una frecuencia determinada. Concretamente, cuando la intensidad del campo homogéneo es de 191.3 kV m^{-1} y la del oscilante de radiofrecuencias es de 20 kV m^{-1}, el mínimo se encuentra a 286.9 kHz, tras ir decreciendo hasta el valor teórico de la frecuencia de resonancia y luego aumentar conformando una curva con una anchura de unos 15 KHz, que coincide con la resolución esperada en las condiciones del experimento. Cuando no se aplica alguno de los campos, oscilante o estático, no tiene lugar la depresión de la intensidad del haz detectado.

En el modelo del rotor rígido los niveles de energía rotacionales perturbados, incluyendo hasta la perturbación de segundo orden, vienen dados por la expresión

$$W = hB\left[J(J+1) + \left(\frac{\mu}{hB}\right)^2 \frac{J(J+1) - 3M^2}{2J(J+1)(2J-1)(2J+3)} E^2\right]$$

donde J es el número cuántico rotacional, E es el campo eléctrcio, M la componente de momento angular según el eje de cuantización, μ el momento eléctrico dipolar permanente y B la constante rotacional. Para la transición considerada, tenemos

$$\Delta W = W(1,0) - W(1,\pm 1) = \frac{3}{20} hB\lambda^2$$

donde $\lambda = \frac{\mu E}{hB}$ y la frecuencia ω de la transición viene dada por

$$\omega = \frac{\Delta W}{\hbar}$$

En el caso de la molécula de N_2O $\mu = 0.161$ D y B=12561.6338+$\pm$ 0.0006 MHz para el estado vibracional (0,0,0). La frecuencia de la transición $(1,\pm 1) \rightarrow (1,0)$ es 286.9 kHz, cuando el campo estático tiene una intensidad de 191.3 kV m^{-1}. La explicación de la depresión del haz observada se propone en términos de la modificación de la población del estado $J = 1$, M_J como consecuencia de la interacción con el campo oscilante resonante.

Como es bien conocido, en una experimento de resonancia eléctrica de haces moleculares se preparan los estados rotacionales de las moléculas polares y se analizan explotando la dependencia con el estado de la interacción del campo eléctrico no homogéneo y el momento eléctrico dipolar. En primer lugar el haz molecular se prepara en el campo A, después se le hace pasar por la unidad resonancte, campo C y, finalmente, opera el analizador, campo B, de forma que solamente las moléculas que se encuentran en el estado preparado pueden alcanzar el detector. En el campo intermedio, C, las moléculas interactúan con dos campos mutuamente perpendiculares, uno estático y homogéneo (DC) y uno oscilante de radiofrecuencias (RF). Cuando éste último se sintoniza a la frecuencia de transición entre los subestados Stark, una fracción de moléculas pasa del estado preparado al excitado que corresponde a la frecuencia que se aplica. La consecuencia es que la intensidad de la señal que se genera en el detector, cae rápidamente. En los experimentos llevados a cabo por González-Ureña y col. [104, 105, 30, 31, 32, 33] con haces de moléculas de NO sembrados en He se observó que la caída de la señal en el detector era debido a la acción del campo de radiofrecuencias,

cuando se conecta a la frecuencia de resonancia entre los dos niveles Stark que el campo estático homogéneo, DC, ha desdoblado.

La interpretación de este fenómeno se formuló en términos de la interferencia de haces moleculares [33]. El modelo se basó en la interacción de un haz supersónico de moléculas polares con tres campos eléctricos oscilantes y resonantes. El primero y el tercero, oscilantes, actúan como divisores del haz y el segundo, situado en medio, actúa como objeto de fase, introduciendo un desplazamiento de fase entre los dos brazos del interferómetro y éste es el responsable de las interferencias.

La unidad resonante constaba de dos placas dieléctricas revestidas de Cu, paralelas y separadas. En una de las placas se practicó un rectángulo aislado eléctricamente del resto de la placa. El rectángulo y el resto de la placa formaban los electrodos a los que se aplica el campo de radiofrecuencias. El voltaje estático se aplica al electrodo rectangular y a la placa opuesta. El haz molecular pasa entre las dos placas y la dirección del flujo es x, aplicando el campo estático, DC, en la dirección perpendicular, z y el campo de radiofrecuencias en la dirección y, que depende del tiempo en la forma

$$E_{RF} = E_0 \cos \omega t$$

siendo E_0 la amplitud del campo, que depende de z.

La unidad entre el campo estático DC y el oscilante RF se pueden considerar como un interferómetro de dos brazos del tipo Ramsey en el que hay dos zonas de frecuencias de radio, localizados a la entrada y salida de la unidad, y actúan como divisores del haz. En esta zona el campo de radiofrecuencias RF induce transiciones entre los niveles Stark desdoblados por el campo DC, como ocurre en un interferómetro Ramsey clásico.

Supongamos un jet continuo de velocidad $\mathbf{v}_0$ que avanza en la dirección x. Sean $|i\rangle$ y $|f\rangle$, los dos estados de H_0, el hamiltoniano del sistema en reposo. $|i\rangle$ es el estado fundamental y $\omega_0 = -\omega_i + \omega_f$ es la frecuencia de la transición $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$. Suponemos que es real $p = \langle i|p_z|f\rangle$, elemento matriz del operador correspondiente a la componente z del momento dipolar $\mathbf{p}$. Un láser continuo interactúa con los átomos. La onda la suponemos plana, cuyo campo eléctrico $\mathbf{E}$ está polarizado linealmente según

el eje OZ. Es monocromática con una longitud de onda sintonizable, ω_L y su amplitud E_0 es constante. Se propaga segun el eje OY, de forma que el desplazamiento Doppler se puede despreciar. El haz láser que cruza el jet perpendicularmente, tiene una sección eficaz de d en la dirección OX. Para x, tal que $0 < x < d$,

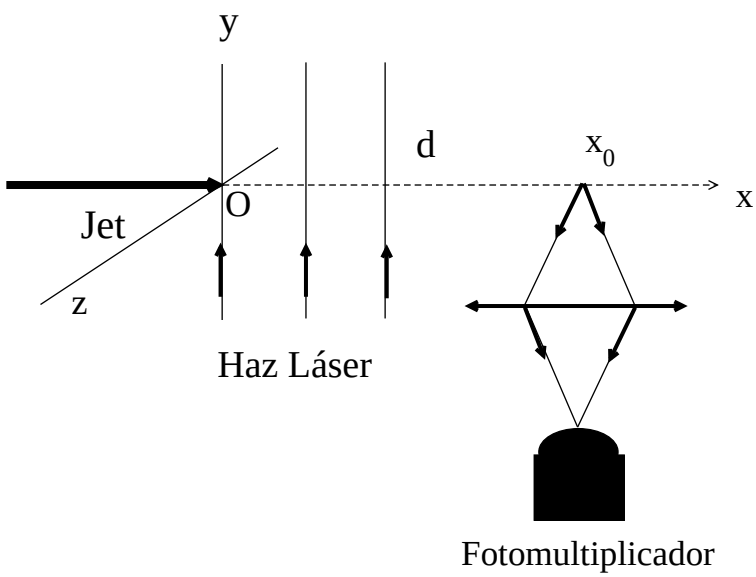

Figura 19 Interferómetro de Ramsey.

Designamos por t_t el tiempo necesario para que un átomo cruce el haz láser. Los átomos que llegan a $x = 0$ y $t = t_0$ están en el estado fundamental $|i\rangle$. Su estado en $x > 0$ se describe mediante un vector de onda dado por

$$|\Psi(t - t_0)\rangle = a(t - t_0)|i\rangle + b(t - t_0)|f\rangle$$

Podemos considerar el dipolo eléctrico y la aproximación de la onda rotante para obtener $a(t - t_0)$ y $b(t - t_0)$, haciendo uso de la teoría de perturbaciones de primer orden, primero para t, tal que

$0 < t - t_0 < t_t$, y a continuación para $t - t_0 > t_t$ y podemos reflexionar acerca del dominio en el que el cálculo perturbativo está justificado. Si consideramos $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos \omega t$ una onda laser polarizada linealmente de amplitud E_0 y frfecuencia angular ω_0 que interactúa con un sistema de dos niveles, cuyo Hamiltoniano es H_0 en ausencia de radiación y la frecuencia del laser la denominamos ω_0 y es muy próxima a la frecuencia de una transición permitida de dipolo eléctrico entre los estados $|i\rangle$ y $|f\rangle$ de $H : 0$, con los correspondientes valores propios $\hbar\omega_i$ y $\hbar\omega_f$, siendo $\omega_i < \omega_f$ y designamos por **p** al operador momento dipolar y $p = \langle i|\hat{p_z}|f\rangle$, y suponesmos que p es real, si pretendemos definir un estado estacionario

$$|\Psi(t)\rangle = a(t)|i\rangle + b(t)|f\rangle$$

representando la evolución en el tiempo del sistema. Si suponemos que a $t = 0$ el sistema está en el estado $|i\rangle$, y usamos la transformación

$$A(t) = a(t)e^{+i\omega_i t} \tag{12}$$

$$B(t) = a(t)e^{+i\omega_f t} \tag{13}$$

podemos calcular $\dot{A}(t)$ y $\dot{B}(t)$, haciendo $\Omega =$pE$_0/\hbar$, la frecuencia de Rabi y resolviendo el sistema de ecuaciones las soluciones nos dan la evolución en el tiempo de las poblaciones de los estados $|i\rangle$ y $|f\rangle$, ya que

$$i\hbar|\dot{\Psi}\rangle = (\hat{H}_0 + V)1\Psi\rangle$$

multiplicando sucesivamente por la izquierda primeramente por $\langle i|$ y después por $\langle f|$, obtenemos

$$\dot{a} = i\omega_i a = (ip/\hbar)E_0 \cos(\omega_L t)b$$
$$\dot{b} = i\omega_f b = (ip/\hbar)E_0 \cos(\omega_L t)a$$

con lo que con el cambio de variables sugerido tenemos

$$\dot{A} = \frac{i\Omega}{2} e^{[-i(\omega_0 - \omega_L)t]B} \tag{14}$$

$$\dot{B} = \frac{i\Omega}{2} e^{[i(\omega_0 - \omega_L)t]A} \tag{15}$$

Si hacemos $t' = t - t_0$ en las Ecuaciones (12) y (13), tenemos

$$a(t') = A(t')e^{-i\omega_i t'}$$
$$b(t') = B(t')e^{-i\omega_f t'}$$

y a partir de las Ecuaciones (14) y (15) obtenemos

$$\dot{A} = \frac{i\Omega}{2} e^{[i(\omega_L - \omega_0)t']} e^{(i\omega_L t_0)} B$$
$$\dot{B} = \frac{i\Omega}{2} e^{[-i(\omega_L - \omega_0)t']} e^{(-i\omega_L t_0)} A$$

Haciendo $A^{(0)} = 1$ y $B^{(0)} = 0$, para los términos de primer orden de la teoría de perturbaciones obtenemos

$$\dot{B}^{(1)} = \frac{i\Omega}{2} e^{[-i(\omega_L - \omega_0)t']} e^{(-i\omega_L t_0)}$$

Para $0 < t' < t_t$ tras integrar tenemos

$$B^{(1)}(t') = [i\Omega e^{-i\omega_L t_0)} t'/2] e^{[-i(\omega_L - \omega_0)} t'/2] \times \frac{\mathrm{sen}[(\omega_L - \omega_0)t'/2]}{[(\omega_L - \omega_o)t'/2]}$$

Para $t' > t_t$ tenemos $B^{(1)}(t') = B^{(1)}(t_t) =$ constante. Los cálculos perturbativos valen si se cumple que $|B^{(1)}(t')| \ll 1$ para todo t', lo que implica que $t' \ll \frac{2}{\Omega}$.

En cada instante t la emisión espontánera se detecta en el fotomultiplicador, conforme los átomos pasan a través de plano $x = x_0$

INTERACCIÓN DE UN HAZ DE MOLÉCULAS POLARES CON CAMPOS ESTÁTICO Y DE RADIOFRECUENCIAS OSCILANTE COMO FUENTE DE INTERFERENCIAS MOLECULARES

Aunque la inerferometría de haces atómicos está bien desarrollada, no hay muchos ejemplos de interferometría molecular, como hemos visto, y solamente se han desarrollado unos pocos interferómetros moleculares, ya citados en el caso del de Ramsey-Borde empleado con I_2 [23], que se utilizó posteriormente para K_2

[24] y un interferómetro mecánico de Mach-Zehnder empleado con Na_2 [25]. Con nanoredes de difracción se evidenció la existencia de dímeros de helio débilmente ligados, midiendo la energía de enlace [27] y los experimentos llevados a cabo por Saffaro y col [106, 89] con moléculas pesadas de C_{70} forman el elenco representativo de los experimentos llevados a cabo.

Supongamos que disponemos de un haz de moléculas polares y vamos a considerar las interacciones con un campo eléctrico estático DC y uno oscilante RF [34]. El campo homogéneo es bien conocido que produce el desdoblameitno Stark que para un nivel rotacional dado J supone el desdoblamiento de los niveles degenerados (J, M_1) y (J, M_2) y el campo RF puede producir una superposición coherente de estos dos estados, cuando la frecuencia del campo RF sea resonante con los dos niveles Stark desdoblados. El ingrediente clave es la existencia de un .ºbjeto de fase"[55], que consta de un campo eléctrico RF que, en condiciones resonantes, da lugar a un potencial de interacción que es diferente para cada brazo del interferómetro, es decir, que interactúa de forma distinta con los estados (J, M_1) y (J, M_2). Como consecuencia de ello se origina un desfase entre ellos y provoca que se produzca una interferencia cuando emerge de la unidad de resonancia, pudiendo observar el patrón de interferencia acumulado cuando se cambia la frecuencia del campo RF.

Para describir y tratar la interacción de moléculas polares con un campo de RF oscilante vamos a poner énfasis en la forma en que las interferencias moleculares son debidas a la oscilación de la fase de una superposición de estados coherentes, provocada por el campo RF resonante. Para interpretar el fenómeno teóricamente, vamos a construir un modelo de dos estados, sometido a un campo electromagnético $\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 \cos \omega t$, que es un modelo bien conocido cuya solución exacta fue propuesta por Rabi [35, 107]. En una descripción semiclásica el Hamiltoniano viene dado por

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \mu \mathbf{E}_1 \cos \omega t = \hat{H}_0 - \mu \frac{\mathbf{E}_1}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

siendo μ momento eléctrico dipolar permanente de la molécula, $\mathbf{E}_1$ y ω son la amplitud y la frecuencia del campo oscilante y $\hat{H}_0$ es es el Hamiltoniando del sistema sin perturbar. El sistema de

dos niveles no degenerados, se caracteriza mediante una función de onda dependiente del tiempo, $\Psi(t)$, dada por

$$\Psi(t) = a(t)e^{-i\omega_a t}\phi_a + b(t)e^{-i\omega_b t}\phi_b \tag{16}$$

siendo $a(t)$ y $b(t)$ los coeficientes de los estados inferior y superior, ϕ_a y ϕ_b, respectivamente. Las energías correspondients las denotamos por $E_a = \hbar\omega_a$ y $E_b = \hbar\omega_b$, de forma que la diferencia de energía $\omega_0 = \omega_a - \omega_b$ es la frecuencia de resonancia. La función de onda $\Psi(t)$ debe satisfacer la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y resolviendo las ecuaciones podemos obtener los coeficientes que, en la aproximación de la onda rotante, RWA, nos proporciona las expresiones,

$$a(t) = \left\{ a(0)\left[\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - \frac{iA}{\Omega}\operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right)\right] \right. \tag{17}$$

$$\left. +i\frac{\Omega_R}{\Omega}b(0)\operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right)\right\} e^{i\Delta t/2} \tag{18}$$

y

$$b(t) = \left\{ b(0)\left[\cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + \frac{iA}{\Omega}\operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right)\right] \right. \tag{19}$$

$$\left. +i\frac{\Omega_R}{\Omega}a(0)\operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right)\right\} e^{-i\Delta t/2} \tag{20}$$

siendo $a(0)$ y $b(0)$ los valores iniciales de los coeficientes, es decir a $t = 0$ y Ω la frecuencia de Rabi generalizada,

$$\Omega = \sqrt{\Lambda^2 + \Omega_R^2}$$

con $\Lambda = \omega - \omega_0$ y Ω_R la frecuencia de Rabi, dada por

$$\hbar\Omega_R = \mu_{ab} \cdot \mathbf{E}_1 \tag{21}$$

y μ_{ab} es el momento dipolar correspondiente a la transición $a \rightarrow b$.

Pero, al mismo tiempo, la acción del campo incidente induce un momento dipolar dado por el valor esperado del operador momento dipolar

$$\mathbf{P}(t) = \langle\Psi(t)|\mu|\Psi(t)\rangle \tag{22}$$

Si hacemos uso de la Ecuación (16) en (22), obtenemos

$$\mathbf{P}(t) = \mu_{ab}\left\{a(t)^* b(t) e^{-i\omega_0 t} + b(t)^* a(t) e^{i\omega_0 t}\right\} \tag{23}$$

La interacción entre el campo de radiofrecuencias y el momento dipolar inducido viene dado por

$$\Delta W(t) = -\mathbf{P}(t)\mathbf{e}_1 \cos\omega t \tag{24}$$

y sustituyendo (23) en (24) tenemos

$$\Delta W(t) = -2\hbar\Omega_R\left\{Q_1 \cos^2\omega t + Q_2 \cos\omega t \operatorname{sen}\omega t\right\}$$

donde Q_1 y Q_2 vienen dadas por

$$\begin{aligned} Q_1 = a(0)b(0)&\left[\cos^2\frac{\Omega t}{2} + \left(\frac{\Omega_R^2 - \Lambda^2}{\Omega^2}\operatorname{sen}^2\frac{\Omega t}{2}\right)\right] \\ &+ \left[b^2(0) - a^2(0)\right]\frac{\Omega_R\Lambda}{\Omega^2}\operatorname{sen}^2\frac{\Omega t}{2} \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} Q_2 = \operatorname{sen}\left(\frac{\Omega t}{2}\right) Q_2 \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right)&\left[a^2(0)\frac{\Omega_r}{\Omega}\right. \\ &\left. -b^2(0)\frac{\Omega_R}{\Omega} + 2a(0)b(0)\frac{\Lambda}{\Omega}\right] \end{aligned}$$

RESONANCIA EN LA INTERACCIÓN DE UN HAZ DE MOLÉCULAS POLARES CON CAMPOS SIMULTÁNEOS ESTÁTICO Y DE RADIOFRECUENCIAS OSCILANTE

En las condiciones de resonancia entre la radiación incidente y los estados implicaods, se cumple

$$\begin{aligned} \omega &= \omega_0 \\ \Lambda &= 0 \\ \Omega &= \Omega_R \end{aligned}$$

con lo que

$$Q_1 = a(0)b(0)$$
$$Q_2 = \left[a^2(0) - b^2(0)\right]\left(\frac{\operatorname{sen}\Omega_R t}{2}\right)$$

La energía de interacción entre el campo de RF y el momento dipolar inducido es

$$\Delta W_0(t) = -2\hbar\Omega_R \left\{a(0)b(0)cos^2\omega_0 t \right.$$
$$\left. + \left[a^2(0) - b^2(0)\right] \times \cos\omega_0 t \operatorname{sen}\omega_0 t \frac{\operatorname{sen}\Omega_R t}{2}\right\}$$

Para dos estados que inicialmente están igualmente poblados

$$a(0) = b(0) = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

con lo que la interacción viene dada por

$$\Delta W_0^{0.5} = -\hbar\Omega_R \cos^2\omega_0 t$$

Para un sistema que inicialmente se encuentra en el estado $a(0) = 1$ y $b(0) = 0$, tenemos

$$\Delta W_0^a(t) = -\hbar\Omega_R\left(\frac{\operatorname{sen}\Omega_R t}{2}\operatorname{sen}2\omega_0 t\right)$$

y, en el caso en que el estado inicial sea el b, es decir, $a(0) = 0$ y $b(0) = 1$, tenemos

$$\Delta W_0(t) = +\hbar\Omega_r\left(\frac{\operatorname{sen}\Omega_R t}{2}\operatorname{sen}2\omega_0 t\right)$$

INTENSIDAD DE LA SEÑAL EN LA INTERACCIÓN DE UN HAZ DE MOLÉCULAS POLARES CON CAMPOS SIMULTÁNEOS ESTÁTICO Y DE RADIOFRECUENCIAS OSCILANTE

En esencia, el experimento consiste en un haz molecular, por ejemplo de NO o N_2O o cualquier otra molécula, diluidos en un

gas soporte, generalmente He, que cruzan una unidad de resonancia del dispositivo incluido en la Figura (18). Conforme la molécula polar viaja a través de la unidad de resonancia se ve sometida a la acción de dos campos eléctricos, uno estático DC según la dirección z y uno perpendicular $E_{RF} = E_y$ que es oscilante y, por tanto, depende del tiempo

$$E_y = E_1 \cos \omega t$$

siendo E_1 la amplitud del campo y ω la frecuencia. El campo de RF va a crear una superposición coherente de estados de los subniveles Stark, creados por el campo eléctrico estático y esto supone la creación de los dos brazos del interferómetro que acumularán distinta fase a la salida del interferómetro, con lo que pueden tener lugar interferencias moleculares.

La molécula cuando entra en el campo Stark y se superpone el campo RF se genera una superposición de estados coherentes, cuya función de onda viene dada por

$$\Psi(t) = A(t)e^{-i\varphi_a} + B(t)e^{-i\varphi_b} \tag{25}$$

donde $A(t)$ es un estado superposición generado a partir del estado inicial que acumula la población en $a(0) = 1$ y $b(0) = 0$, dado por

$$A(t) = a_a(t)\phi_a + b_a(t)\phi_b \tag{26}$$

siendo $a_a(t)$ la $a(t)$ correspondiente al valor obtenido a partir de la Ecuación (17) cuando $a(0) = 1$ y $b(0) = 0$ e, igualmente, $b_a(t)$ es $b(t)$, cuando $a(0) = 1$ y $b(0) = 0$. Del mismo modo, tenemos

$$B(t) = a_b(t)\phi_a + b_b(t)\phi_b \tag{27}$$

siendo φ_a la fase debida a la interacción entre el dipolo inducido y el campo RF, cuando la población inicial solamente se encuentra en el estado a, es decir $a(0) = 1$ y $b(0) = 0$. Del mismo modo, φ_b es la fase debida a la interacción entre el momendo dipolar inducido y el campo RF, cuando la población inicial total corresponde al estado b, es decir $a(0) = 0$ y $b(0) = 1$.

La señal total del haz, se puede obtener mediante

$$S \approx \langle \Psi^* | \Psi \rangle \tag{28}$$

con lo que haciendo uso de las Ecuaciones (25), (26), 27) junto con (17) y (19) en (28) obtenemos la señal del haz en función del desfase φ_{ab}.

Para obtener el desfase introducido por el campo RF oscilante cuando interacciona con el sistema de dos estados tenemos [108]

$$\varphi_{ab} = \frac{\Delta W_{ab}}{\hbar} t \tag{29}$$

y por tanto, obteniendo la energía de interacción a partir de la Ecuación (24), obtenemos el desfase de la Ecuación (29) y, por tanto, la señal total del haz, S, dada por la Ecuación (28).

INTENSIDAD DE LA SEÑAL DE UN HAZ SUPERSÓNICO SOMETIDO A CAMPOS ESTÁTICO Y OSCILANTE, EN CONDICIONES DE RESONANCIA

Vamos a particularizar la determinación de la intensidad de la señal correspondiente a la interacción de un haz molecular con campos estático y oscilante simultáneos cuando la frecuencia del campo de RF es resonante con la transición entre los estados moleculares a y b. en este caso $\Delta = 0$ y la frecuencia generalizada de Rabi coincide con la de Rabi, $\Omega = \Omega_R$, con lo que obtenemos

$$A(t) = \left[\left(\cos \frac{\Omega_R t}{2} \right) \varphi_a + i \left(\operatorname{sen} \frac{\Omega_R t}{2} \right) \varphi_b \right]$$
$$B(t) = \left[i \left(\operatorname{sen} \frac{\Omega_R t}{2} \right) \varphi_a + \left(\cos \frac{\Omega_R t}{2} \right) \varphi_b \right]$$

La señal del haz, en este caso viene dada por

$$S \approx \langle \phi_a^2 + \phi_b^2 + 2\phi_a\phi_b \cos\varphi_{ab} + (\phi_a^2 - \phi_b^2) \operatorname{sen} \Omega_R t \operatorname{sen} \varphi_{ab} \rangle \tag{30}$$

donde φ_{ab} es, el desfase, dado por

$$\varphi_{ab} = \varphi_a - \varphi_b \tag{31}$$

donde φ_a y φ_b son las fases debidas a la interacción con el campo RF cuando la población inicial solamente está en el estado a y en el estado b, respectivamente. En el modelo de dos estados considerado, el desfase viene dado por

$$\varphi_{ab}(\Lambda = 0) = \Omega_R\, t(\operatorname{sen}\Omega_R\, t \operatorname{sen}\, 2\omega_0 t)$$

La interpretación de los datos experimentales requiere la convolución de la Ecuación (30) extendida al intervalo de parámetros experimentales que caracterizan el volumen de haz que alcanza el detector. Para ello vamos a asumir que la velocidad de las moléculas del haz supersónico viene descrita por

$$f(v) = N\frac{v^2}{\sigma^3}e^{-(v-v_0)^2/\sigma^2} \tag{32}$$

siendo N una constante de normalización, v_0 la velocidad pico y σ está relacionada con la anchura de la distribución.

La convolución de (30) con (32) proporciona la ecuación

$$S = C\left\{\phi_a^2 + \phi_b^2 + 2\phi_a\phi_b \int_{v_i}^{v_f} f(v)\, \cos\varphi_{ab}\, dv \right. \tag{33}$$

$$\left. +(\phi_a^2 - \phi_b^2)\int_{v_i}^{v_f} f(v)\, \operatorname{sen}\Omega_R t\, \operatorname{sen}\varphi_{ab}\, dv\right\} \tag{34}$$

siendo C una constante de proporcionalidad y $f(v)$ la ley de distribución de velocidades correspondiente al haz supersónico.

Observando las Ecuaciones (30) y (33) vemos que en ausencia del campo resonante para el que $\Omega_R = 0$, el valor de la señal S no oscila. Esto evidencia que la señal correspondiente a la intensidad total del haz requiere la presencia del campo RF como única vía para inducir un desfase entre las superposiciones coherentes representadas por las funciones $A(t)$ y $B(t)$.

Si los dos estados coinciden, es decir $\varphi_a = \varphi_b$, la interferencia solamente puede deberse al término $\cos\varphi_{ab}$. Así pues, la interferencia en el haz se puede detectar o bien midiendo la intensidad del haz en función de t (contenido en φ_{ab} dado en la Ecuación (31), lo cual equivale a medir la intensidad del haz en función de la velocidad molecular para un valor dado de Ω_R o, alternativamente, variando Ω_R, dado por la Ecuación (21) que implica

variar el campo oscilante aplicado. En este caso mantendremos la velocidad del haz molecular fija.

La existencia de un gradiente en el campo RF introduce una dependencia en z de la frecuencia de Rabi y, por tanto, del desfase. La consecuencia será que el perfil transversal del haz tendrá estructura y las franjas de interferencia tendrán una visibilidad que dependerá del valor del gradiente del campo.

La interpretación de la dependencia de la interferencia con el campo Rf implica que no hay superposición coherente de estados en ausencia del campo RF y, como consecuencia no hay desfase entre los dos estados acoplados. en este caso tendríamos una mezcla de estados y no un estado coherente. Esto implica que la matriz densidad no contiene términos no diagonales y la población reside exclusivamente en los diagonales. Es lo que ocurre cuando un sistema molecular se somete a la acción de un campo eléctrico estático, efecto Stark.

Los experimentos sugeridos implican dos tipos de interferogramas: el de frecuencia y el de perfil transversal. En el primero de ellos la intensidad de la señal corresponde al haz que pasa a través de un colimador estrecho localizado en la parte central del eje del haz y se mide la señal en función de la frecuencia del campo RF. En el segundo tipo de interferograma, la señal del haz se controla en función de la posición transversal del haz, manteniendo el resto inalterado y el campo RF fijo.

En la Figura (20) vemos una gráfica del desfase en función de la frecuencia de Rabi

para un haz molecular que se supone monoenergético con una velocidad de pico de $v_0 = 750$ m s^{-1} y una distribución de velocidad suficientemente estrecha para considerar, por ejemplo una dispersión de $\sigma \leq 5$m s^{-1} [34]. Se supone una frecuencia del campo RF de 157 kHz. Podemos observar como oscila el desfase conforme aumenta la frecuencia de Rabi y la oscilación tiene una amplitud tanto mayor cuanto mayor es la frecuencia de Rabi, lo que equivale a una magnitud que aumenta con la intensidad del campo aplicado, para una molécula dada o, equivalentemente, una oscilación con amplitud tanto mayor cuanto mayor sea el momento dipolar de la molécula, más polar, para un campo oscilante dado. En ausencia de campo eléctrico oscilante o para una mo-

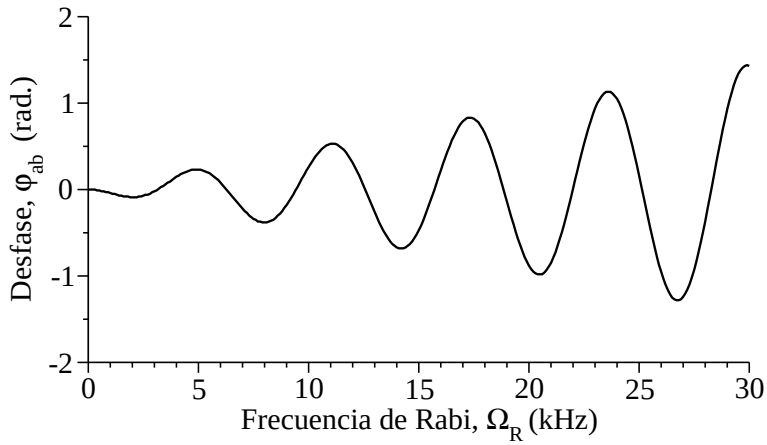

Figura 20 Desfase entre los dos estados superposición coherente en función de la frecuencia de Rabi

lécula polar, las oscilaciones están ausentes y les correspondería una frecuencia de Rabi nula.

En la Figura (21) incluimos el espectro de transmisión de un haz molecular que atraviesa una unidad resonante, representando la intensidad del haz normalizada que el detector registra en función de la intensidad del campo oscilante de RF aplicado, utilizando como coordenada la frecuencia de Rabi.

Al igual que en el caso anterior se supone un haz molecular con una velocidad de 750 m s^{-1} y una frecuencia de resonancia de 157 kHz. La intensidad se ha normalizado a 1 a la frecuencia de Rabi cero, lo que corresponde a una campo RF nulo. Podemos observar una naturaleza oscilatoria del espectro, con puntos en los que es máxima seguidos de otros en que pasa por mínimos. El origen de este comportamiento está en la naturaleza ondulatoria del desfase.

Es de observar que para valores elevados de la frecuencia de Rabi las oscilaciones son mucho más intensas, es decir la depresión de la intensidad observada se ve potenciada por la intensidad del campo RF aplicado. Para valores próximos a 30 kHz la intensidad del haz transmitido llega a ser de 0.57, lo que supone una reducción intensísima de la misma. La naturaleza oscilatoria de la señal del haz transmitido es una consecuencia de la interferencia

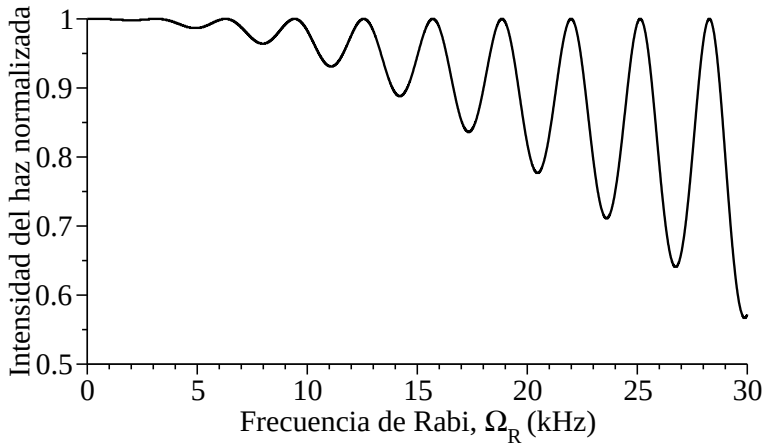

Figura 21 Espectro de transmisión en función de la frecuencia de Rabi

molecular derivada de las oscilaciones del desfase entre los dos estados moleculares.

La distinta funcionalidad del desfase y de la intensidad del haz supone que la oscilación de ambos no es coincidente, como podemos observar en las Figuras (29) y (21) y en la Tabla (1.1) Una forma alternatica de introducir desfases consiste en mantener el valor de la frecuencia de Rabi constante, por tanto el campo oscilante RF es constante, pero cambiando el tiempo de permanencia de la molécula en la unidad de resonancia con lo que modificamos el tiempo de interacción de la molécula con el campo. En la Figura (22)
incluimos una representación de la intensidad del haz para un haz sometido a un campo RF dado por una frecuencia de Rabi de 30 kHz y una frecuencia de resonancia de 50 kHz.

El comportamiento tanto del desfase como de la intensidad transmitida a través de la unidad de resonancia muestra que es el campo de RF el que induce las interferencias moleculares. Inicialmente el pequeño desdoblamiento Stark asegura una población estadística en cada uno de los subestados (J, M) que desdobla. La probabilidad de cada superposición coherente $A(t)$ y $B(t)$ es la que posibilita las interferencias moleculares a través del desfase que introduce entre los dos estados que actúan como si se tratara

Tabla 1.1 Máximos y minimos del desfase y de la intensidad del haz normalizada del espectro de transmisión.

Desfase (radianes)			
Mínimo		**Máximo**	
Ω_R	**Desfase**	Ω_R	**Desfase**
2.05	-0.09	4.90	0.23
8.00	-0.38	11.10	0.53
14.20	-0.68	17.30	0.83
20.50	-0.98	23.60	1.13
26.75	-1.28	29.90	1.44
Intensidad (normalizada)			
Mínimo		**Máximo**	
Ω_R	**Intensidad**	Ω_R	**Intensidad**
4.91	-0.987	6.28	1
7.98	-0.964	9.42	1
11.08	-0.931	12.56	1
14.21	-0.888	15.70	1
17.33	-0.836	18.85	1
20.47	-0.777	21.99	1
23.60	-0.711	25.63	1
26.74	-0.641	26.74	1
29.88	-0.0.567	29.88	1

de los dos brazos de un interferómetro convencional. Los desfases son los que dan lugar a las oscilaciones cuánticas en la matriz densidad y son los que afectan a la señal del haz transmitido.

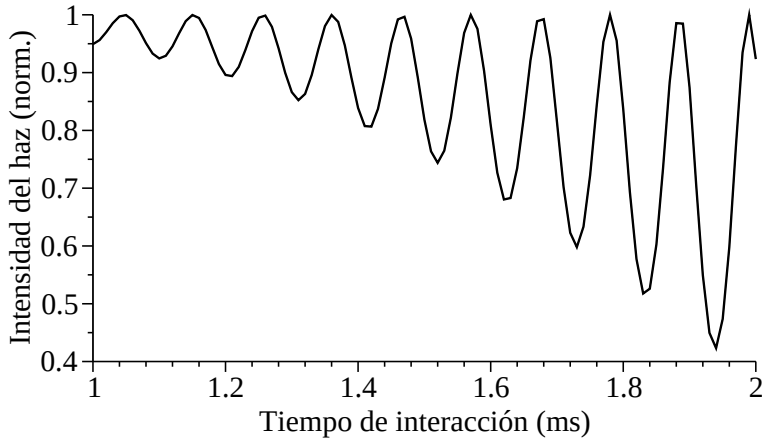

Figura 22 Señal de transmisión en función del tiempo de residencia en la unidad de resonancia

INTERFERENCIAS MOLECULARES EN HACES DE NO

La molécula de NO es un excelente ejemplo para comparar teoria con experimento. González Ureña y col. [31] efectuaron medidas del perfil transversal de la molécula NO. Una de las cuestiones a resolver está relacionada con la población rotacional de los estados (J, M) seleccionados, dada la carencia de información de los estados iniciales por imposibilidad de acceder a su medida. Simulando el espectro transmitido a distintas temperaturas rotacionales se observó [31] que el único cambio percibible era la intensidad de la señal del haz transmitido, pero no la formaectral detallada. Esto parece indicar que la comparación debe hacerse tratando de ver en que grado la teoria es capaz de reproducir la estructura detallada de los picos del espectro de transmisión observado experimentalmente, variando algún parámetro, como por ejemplo la frecuencia de Rabi. En la Figura (23) vemos una comparación entre los calculos teóricos y los resultados experimentales efectuados en [34]. La línea continua de color corresponde a los resultados del modelo teórico y la línea de trazos corresponde los resultados experimentales.

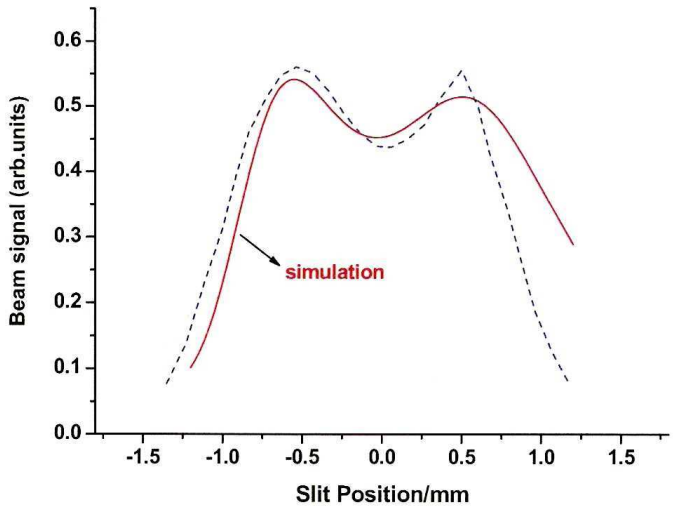

Figura 23 Señal del haz molecular en función de la posición de la rendija para NO

En la comparación entre los perfiles teóricos y experimentales [31] del haz molecular de NO se obtuvo una frecuencia de Rabi $omega_R = 3.0kHz - (2.6 \times z)$, como mejor ajuste del parámetro, siendo z en mm la distancia perpendicular al eje de propagación del haz. En la simulación se tuvo en cuenta tanto la velocidad de distribución del haz molecular como el perfil geométrico del haz determinado cuando está desconectado el campo de RF, condición en la que no hay presente estructura alguna, con lo que la ausencia de picos, solamente es debido al perfil del haz, cuasi gausiano que se mide en ausencia del campo RF. Los resultados fueron ampliamente satisfactorios, salvo la frecuencia de Rabi que resultó ser muy inferior al de 119 kHz estimado en la referencia [33]. Se interpreta la posibilidad de la presencia de clusters de NO$\cdots$He$_n$ $n > 1)$que podrían afectar a la interacción con el campo resonante. Por otro lado la frecuencia Stark en este caso no se vería significativamente afectada, mientras que la frecuencia Rabi si. En todo caso son refinamientos que en estos momentos están siendo investigados.

NOTAS FINALES

Las interferencias moleculares constituyen un campo novedoso y prometedor que se fundamenta en los amplios y anteriores desarrollos logrados en la interferencia de ondas y atómica y que con las nuevas herramientas tanto teóricas como experimentales, ahora a nuestra disposición, nos permiten abordar estudios que profundizan en aspectos fundamentales de la Química y Física de las moléculas y, al mismo tiempo nos permiten formular nuevas técnicas para acceder a propiedades moleculares.

Hemos presentado el desarrollo de un modelo de interacción entre las moléculas polares y los campos eléctricos, estático y oscilante, que aunque constituyen elementos usuales en las técnicas espectroscópicas de resonancia eléctrica de haces moleculares, ahora abren la posibilidad de lograr interferencias moleculares inducidas por la superposición coherente de estados desdoblados mediante la aplicación de un campo eléctrico estático, gracias al efecto Stark y la aplicación de un campo eléctrico oscilante de radiofrecuencias resonante con las transiciones permitidas entre los subniveles Stark.

Hemos descrito con cierto detalle como el campo RF induce las interferencias moleculares precisando que el desdoblamiento Stark provoca una población estadística similar en los subestados generados en el desdoblamiento, con similares probabilidades estadísticas en cada una de las superposiciones coherentes y que es el desfase inducido por el campo oscilante de RF el que da lugar a las oscilaciones en la matriz densidad que son las que se registran en la señal que produce el haz molecular al alcanzar el detector.

Estop representa una nueva aproximación a la interferometría de ondas de materia para moléculas polares que solamente requiere el empleo de una unidad C para lograr la coherencia de la superposición de estados moleculares. Tanto si se varía la frecuencia de Rabi, lo que concreta la variación de la amplitud del campo eléctrico oscilante, como si se varía el tiempo de residencia en la unidad de resonancia del dispositivo, se pueden obtener patrones de interferencia molecular.

Se abre un nuevo campo en el que el estudio de la decoherencia cuántica de los haces moleculares, tanto cuando emergen de

la unidad de resonancia como si se trata de la consecuencia de las colisiones con otras moléculas que actúan a modo de reactivos o incluso de moléculas no reactivas, permitirá ahondar en el control cuántico de la reactividad a través de la coherencia de las superposiciones de estados. Otro campo de interés es el relacionado con la interferencia molecular en función de la velocidad molecular que suministra información sobre la naturaleza cuántica de los estados internos moleculares.

AGRADECIMIENTOS

Las investigaciones experimentales que han dado lugar al trabajo presentado se han realizado en el Grupo de Láseres y Haces moleculares del Instituto de Estudios Pluridisciplinares de la Universidad Complutense de Madrid, dirigido por el Prof. Angel González Ureña a quien expreso mi más sincero agradecimiento por los intensos y fructiferos debates científicos que solemos mantener habitualmente y de donde se han desprendido colaboraciones sobresalientes, como éstas. A sus colaboradores corresponde una parte de los trabajos en los que se han basado los desarrollos teóricos incluidos aquí y es obligado el reconocimiento a un excelente trabajo realizado.

El grupo de Láseres, Espectroscopía Molecular y Química Cuántica que coordino en el Departamento de Química Ficia de la Universidad de Murcia y en especial los Profesores, Dr. José Zúñiga Román y Adolfo Bastida Pascual, con quienes desarrollo la actividad investigadora constante y cotidianamente, constituyen un entorno de trabajo científico donde fructifican investigaciones de alcance como la aquí presentada, que usualmente se publican en las revistas científicas más prestigiosas del área. Mi agradecimiento y reconocimiento sinceros por la actividad tan fructifera a través de tantos años de colaboración estrecha.

Un sincero agradecimiento y recuerdo para todas las personas que de una u otra forma han estado relacionados con las actividades de investigación que ahora se ven reflejadas en los trabajos realizados recientemente. Tanto a los hoy profesores en otros Centros Universitarios como a becarios de investigació y colaboradores de distintas Universidades españolas y extranjeras que

figuran como coautores en los trabajos ya publicados y que han ido perfilando las lineas de investigación desarrolladas a lo largo del tiempo.

Llegados a este punto, no está mal recordar que según proclamaba el fenecido John Lennon, *la Vida es... lo que pasa mientras estamos ocupados en otras cosas*, como ésta, desde luego.

Bibliografía

[1] A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger, Phys. Rev. Lett **47**, 460 (1981).

[2] P. Kwiat, Phys. Rev. Lett. **75**, 4337 (1995).

[3] T. Engel and P. Reid, in *Química Física*, edited by Pearson. Addison Wesley Madrid, Traducción de A. Requena y J. Zúñiga. Universidad de Murcia, 2006.

[4] M. Planck, Verb. Dtsch. Phys. Ges. **2**, 237 (1900).

[5] P. Lenard, Ann. Phys.(Leizpig) **8**, 149 (1902).

[6] A. Einstein, Am. Phys. (Leizpig) **17**, 132 (1905).

[7] L. de Broglie, Nature (London) **112**, 540 (1923).

[8] L. Davisson and L. Germer, Phys. Rev. **30**, 705 (1927).

[9] I. Stermann and O. Stern, Z. Phys. **61**, 95 (1930).

[10] H. V. Halban and P. Presiswerk, C.R. Acad. Sci. Paris **203**, 73 (1936).

[11] C. Jönsson, Am. J. Phys. **42**, 4 (1974).

[12] A. Zeilinger, R. Gähler, C. Shull, W. Treimer, and W. Mampe, Rev. Mod. Phys. **60**, 1067 (1988).

[13] O. Carnal and J. Mlynek, Phys. Rev. Lett. **66**, 2689 (1991).

[14] W. Schöllkopf and J. Toennies, Science **266**, 1345 (1994).

[15] W. Schöllkopf and J. Toennies, J. Chem. Phys. **104**, 1155 (1996).

[16] T. W. Hansch and A. L. Schawlow, J. Chem. Phys. **13**, 68 (1975).

[17] D. Wineland and H. Dehmelt, Bull. Am. Phys. Soc. **20**, 637 (1975).

[18] S. Chu, Rev. Mod. Phys. **70**, 685 (1998).

[19] C. N. Cohen-Tannoudji, Rev. Mod. Phys. **70**, 707 (1998).

[20] W. D. Philips, Rev. Mod. Phys. **70**, 721 (1998).

[21] M. Anderson, J. Ensher, M. Matthews, D. Wieman, and E. Cornell, Science **269**, 198 (1995).

[22] K. Davis, M.O.Mewes, M. Andrews, N. Druten, D. Durfee, D. Kurn, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **73**, 3969 (1995).

[23] C. J. Bordé, N. Courtier, F. du Burck, A. N. Goncharov, and M. Gorlicki, Phys. Lett. A **188**, 187 (1994).

[24] C. Lisdat, M. Franck, H. Knöckel, M. Almanzor, and E. Tiemann, Eur. Phys. J. D **12**, 235 (2000).

[25] M. S. Chapman, C. Ekstrom, T. Hammond, R. Rubenstein, J. Chemiedmayer, S. Wehinger, and D. Pritchard, Phy. Rev. Lett. **74**, 4783 (1995).

[26] J. Clauser, in *Experimental Metaphysics*, edited by R. Cohen et al., Kluwer, Dondrecht, 1997.

[27] R. Grisenti, W. Shöllkopf, J. Toennies, G. Hegerfeldt, T. Köhler, and M. Stoll, Phys. Rev. Lett. **85**, 2284 (2000).

[28] O. Nairz, M. Arndt, and A.Zeilinger, J. Chem. Phys. **71**.

[29] A. González-Ureña et al., Chem. Phys. Lett. **341**, 495 (2001).

[30] J. O. Cáceres, C. Montero, M. Morato, and A. González-Ureña, Chem. Phys. Lett. **426**, 214 (2006).

[31] M. Morato, J. O. Cáceres, and A. González-Ureña, Eur. Phys. J. D **38**, 215 (2006).

[32] J. O. Cáceres, M. Morato, and A. González-Ureña, J. Phys. Chem. A **110**, 13643 (2006).

[33] A. González-Ureña, J. O. Cáceres, and M. Morato, Chem. Phys. **328**, 156 (2006).

[34] A. González-Ureña, A. Requena, A. Bastida, and J. Zúñiga, Eur. Phys. J. D **49**, 297 (2008).

[35] N. F. Ramsey, in *Molecular Beams*, Oxford University Press, UK, 1965.

[36] C. A. Kocher and E. D. Commins, Phys. Rev. Lett. **18**, 575 (1967).

[37] G. Taylor, Proc. Camb. Phil. Soc. **15**, 114 (1909).

[38] C.K.Hong, Z. Ou, and L. Mandel, Phys. Rev. Lett **59**, 2044 (1987).

[39] X. Zou, L. Wang, and L. Mandel, Phys. Rev. Lett. **67**, 318 (1991).

[40] L. D. Broglie and V. A. Fok, *Examen de la Mecánica Cuántica*, Suplementos del Seminario de Problemas científicos y Filosóficos. Universidad Nacional de México, 1961.

[41] O. Frisch, H. von Halban Jr, and J. Koch, Phys. Rev. **53**, 719 (1938).

[42] G. Möllenstedt and H. Düker, Z. Phys. **145**, 377 (1956).

[43] A. Tomomura, *Electron Holography*, Springer New York, 1993.

[44] H. Rauch, W. Treimer, and U. Bonse, Phys. Lett. A **47**, 369 (1974).

[45] T. Bitter and D. Dubbers, Phys. Rev. Lett. **59**, 251 (1987).

[46] H. Weinfurter and G. Badurek, Phys. Rev. Lett. **64**, 1318 (1990).

[47] Y. L. Sokolov, Sov. Phys.-JETP **36**, 243 (1973).

[48] J. Bjorkholm, R. Freeman, A. Ashkin, and D. Pearson, Phys. Rev. Lett. **41**, 1361 (1978).

[49] J. Bjorkholm, R. Freeman, A. Ashkin, and D. Pearson, Appl. Phys. Lett. **36**, 99 (1980).

[50] J. Bjorkholm, R. Freeman, A. Ashkin, and D. Pearson, Opt. Lett. **5**, 11 (1980).

[51] W. Balykin, V. Letokhov, and V.-I. Mishin, Pis. Zh. Eksp. Teor. Fiz. **29**, 614 (1979).

[52] W. Philips and H. Metcalf, Phys. Rev. Lett. **48**, 596 (1982).

[53] C. Bradley, C. Sackett, J. Tollet, and R. Hulet, Phys. Rev. Lett. **75**, 1687 (1995).

[54] M. Andrews, C. Townsend, H. Miesner, D. Durfee, M. Kurn, and W. Ketterle, Science **275**, 637 (1997).

[55] J. Baudon, R. Mathevet, and J. Robert, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **32**, R173 (1999).

[56] D. Keith, C. Ekstrom, Q. Turchette, and D. Pritchard, Phys. Rev. Lett. **66**, 2693 (1991).

[57] F. Riehle, T. Kisters, A. Witte, J. Helmcke, and C. J. Bordé, Phys. Rev. Lett. **67**, 177 (1991).

[58] M. Kasevich and S. Chu, Phys. Rev. Lett. **67**, 181 (1991).

[59] J. Robert, C. Miniatura, S. le Boiteux, J. Reinhardt, V. Bocyarski, and J. Baudon, Europhys. Lett. **16**, 29 (1991).

[60] C. A. anda M. Sigel and J. Mlynek, Phys. Rep. **240**, 143 (1994).

[61] C. A. anda M. Sigel and J. Mlynek, Appl. Phys. B **60**, 181 (1995).

[62] V. Chebotayev, J. Opt. Soc. Am. B **2**, 1791 (1985).

[63] C. Bordé, Phys. Rev. Lett. **140**, 10 (1989).

[64] G. Herzberg, in *Spectra of Diatomic Molecules*, edited by Van Nostrand, Princeton, 1950.

[65] A. Requena and J. Zúñiga, in *Espectroscopía*, edited by Pearson, Prentice Hall Madrid, 2004.

[66] J. Anderson, C. Traymor, and B. Boghosian, J. Chem. Phys. **99**, 345 (1993).

[67] K. Tang, J. Toennies, and C. Yiu, Phys. Rev. Lett. **74**, 1546 (1995).

[68] R. Aziz and M. Slaman, J. Chem. Phys **94**, 8047 (1991).

[69] R. Vos, J. von Lenthe, and F. von Duijneveldt, J. Chem. Phys. **93**, 643 (1990).

[70] F. L. et al., J. Chem. Phys. **98**, 3564 (1993).

[71] E. S. Meyer, J. Mester, and I. Silvera, J. Chem. Phys **100**, 4021 (1994).

[72] W. Schöllkopf and J. Toennies, J. Chem. Phys. **104**.

[73] G. Camy, N. Courtier, and J. Helmcke, Single recoil component optical Ramsey fringes at 514.5 nm in an I_2 supersonic beam, in *Laser spectroscopy*, edited by W. Scientific, pages 386–387, Singapore, 1987.

[74] J. Schmiedmayer, M. Chapman, C. Ekstrom, T. Hammond, S. Wehinger, and D. Pritchard, Phys. Rev. Lett. **74**, 1043 (1995).

[75] J. A. Beswick and A. Requena, J. Chem. Phys. **72**, 3018 (1980).

[76] J. A. Beswick and A. Requena, J. Chem. Phys. **73**, 4347 (1980).

[77] J. A. Beswick and A. Requena, Nuovo Cimento. **638**, 46 (1981).

[78] M. Arndt, M. B. Duhan, D. Guéry-Odelin, M. Reynolds, and J. Dalibard, Phys. Rev. Lett. **79**, 625 (1997).

[79] V. Efimov, Comments Nucl. Part. Phys. **19**, 2371 (1990).

[80] B. Esry, D. Lin, and C. Greene, Phys. Rev. A **54**, 394 (1996).

[81] D. Bessanini, M. Zavaglia, M. Mella, and G. Morosi, J. Chem. Phys. **112**, 717 (2000).

[82] M. Barranco, J. Navarro, and A. Poves, Phys. Rev. Lett. **78**, 4729 (1997).

[83] R. Guardiola and J. Navarro, Phys. Rev. Lett. **84**, 1144 (2000).

[84] D.R. Miller, in *Atomic and Molecular Beam Methods*, edited by G. Scoles, Oxford University Press New York, 1988.

[85] H. Rauch and S. Werner, in *Neutron Interferometry*, Oxford Universuty Press New York, 2000.

[86] T. L. Gustavson, P. Bouyer, and M. A. Kasevich, Phys. Rev. Lett. **78**, 2046 (1997).

[87] D. S. Weiss, B. Young, and S. Chu, Phys. Rev. Lett. **70**, 2706 (1993).

[88] M. Arndt, O. Nairz, and A. Zeilinger, in *Quantum [Un]Speakables*, edited by R. Bertlmann and A. Zeilinger, Springer, New York, 2002.

[89] B. Brezger, L. Hackermüller, S. Uttenthaler, J. Petschinka, M. Arndt, and A. Zeilinger, Phys. Rev. Lett. **88**, 100404 (2002).

[90] J. Clauser and S. Li, Phys. Rev. A **49**, R2213 (1994).

[91] L. Deng, E. Hagley, J. Denschlag, J. E. Simsarian, M. Edwards, C. W. Clark, K. Helmerson, S. Rolston, and W. D. Phillips, Phys. Rev. Lett. **83**, 5407 (1999).

[92] H. F. Talbot, Philos. Mag. **9**, 401 (1836).

[93] K. Patorski, Porg. Opt. **27**, 1 (1989).

[94] C. Brukner and A. Zeilinger, Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A **360**, 1061 (2002).

[95] R. P. Feynman and A. Hibbs, in *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.

[96] H. Kroto, J. Heath, S. O'Brian, R. Curl, and R. Smalley, Nature (London) **318**, 162 (1985).

[97] P. V. Cittert, Physica (Amsterdam) **1**, 201 (1934).

[98] F. Zernike, Physica (Amsterdam) **5**, 785 (1938).

[99] M. Born and E. Wolf, in *Principles of Optics*, Pergamon, New York, 1993.

[100] R. Grisenti, W. Shöllkopf, J. Toennies, G. Hegerfeldt, and T. Köhler, Phys. Rev. Lett. **83**, 1755 (1999).

[101] R. Mitzner and E. Campbell, J. Chem. Phys. **103**, 2445 (1995).

[102] K. Hansen and E. Campbell, Phys. Rev. E **58**, 5477 (1998).

[103] M. Dorado, An. Física **93**, 105 (1997).

[104] C. Montero, A. González-Ureña, J. Cáceres, M. Morato, J. Najera, and H. Loesch, Eur. Phys. J. D **26**, 261 (2003).

[105] M. Morato, K. Gasmi, C. Montero, and A. González-Ureña, Chem. Phys. Lett. **392**, 255 (2004).

[106] L. Saffaro, World Sientific Singapore **2**, 55 (1992).

[107] J. I. Steinfeld, in *Molecules and Radiation: An Introduction to Modern Spectroscopy*, Cambridge Massachusetts, 1993.

[108] R. Glauber, in *Lectures in Theoretical Physics*, Interscience, N.Y., 1959.