

REVISTA  
DE LA  
**REAL ACADEMIA  
DE CIENCIAS**  
Exactas  
Físicas  
Químicas y  
Naturales  
DE  
**ZARAGOZA**



Serie 2.<sup>a</sup>  
Volumen 65

2010

## ÍNDICE DE MATERIAS

Infinite dimensional linear groups: how we have studied them JAVIER OTAL .....	7
El efecto túnel en magnetismo FERNANDO LUIS .....	35
El discurrir de los médicos sobre algunos problemas clásicos de Cálculo de Probabilidades MIGUEL ANDÉRIZ LÓPEZ .....	99
Formalizing Antinomic Terms and Predicates F. G. ASENJO .....	119
ACTIVIDADES DE LA REAL ACADEMIA DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS, QUÍMICAS Y NATURALES DE ZARAGOZA EN EL AÑO 2010 .....	131
Instrucciones a los autores .....	137
Intercambio de Publicaciones .....	139

---

---

---



# Infinite dimensional linear groups: how we have studied them

Javier Otal

Departamento de Matemáticas - IUMA

Universidad de Zaragoza. C/ Pedro Cerbuna 12, 50009 Zaragoza, SPAIN.

*Premio a la Investigación de la Academia 2010. Sección de Exactas*

## Abstract

Let  $V$  be a vector space over a field  $F$ . A *linear group* is a subgroup  $G$  of the general linear group  $GL(V, F)$  of  $V$  over  $F$ , the group of all  $F$ -automorphisms of  $V$  under composition. Since the early times of the theory of groups, finite dimensional linear groups (that is,  $\dim_F V$  finite) are one of the mathematical objects most studied (see [51]). However, the case in which the dimension is infinite has only received systematic attention in the late years. In this survey paper we review the approach we have made to this topic in the last decade as well as the main results we have obtained. The more achieved parts of this research consider as fundamental tool *the central dimension of a linear group*  $G$ , that is the  $F$ -dimension of  $V/C_V(G)$ . We focus our study on the set of all proper infinite central dimensional subgroups of  $G$ . A wide description of certain generalized soluble infinite central dimensional linear groups in which that set satisfies one of the standard chain conditions is given as well the relationship among them is established. We also survey other related topics that we studied with occasion of this investigation, namely *linear groups admitting an infinite central deviation* and *antifinitary linear groups*.

**Key Words:** Soluble group. Radical group. Linear group. Central dimension of a linear group. Minimal and maximal conditions. Weak minimal and weak maximal conditions. Infinite central deviation. Augmentation dimension of a linear group. Antifinitary linear group.

**2001 MSC:** Primary: 20F22, Secondary: 20H20.

## Layout of the paper

Let  $V$  be a vector space over a field  $F$ . The *general linear group*  $GL(V, F)$  of  $V$  over  $V$  consists of all  $F$ -automorphisms of  $V$  made group under composition of maps. A *linear*

group  $G$  (over  $F$ ) is exactly a subgroup  $G \leq GL(V, F)$ . If  $\dim_F V = n$  is finite,  $G$  is said to be a *finite dimensional linear group* (of degree  $n$ ); otherwise  $G$  is said to be *infinite dimensional*. Finite dimensional linear groups are known to be matrix groups, and so they are one of the mathematical objects more studied due to the rich interplay between them and their applications inside or outside of Mathematics.

However this is not the case of infinite dimensional linear groups, who have not received a systematic attention until the last 25 years. This paper is a survey that reviews a substantial part of that is known until now. Section 1 briefly describes that is known up the end of the past century, finite dimensional or infinite dimensional as the finitary linear groups. In Section 2 we introduce and explain the role of the fundamental tool in our study: the central dimension of a linear group. Sections 3 and 4 quote with much care the main results obtained in the early years of this century in this direction of research. Finally, Section 5 is devoted to establish the structure of the first type of infinite dimensional linear groups we considered, namely the antifinitary linear groups.

Our group-theoretical notation is standard and is taken out from [48].

## 1 Antecedents of the theory

We briefly summarize in this Section some of the previous facts studied before our study.

### 1.1 Finite dimensional linear groups

Suppose that  $\dim_F V = n$ . Then it is elementary to establish an isomorphism  $GL(V, F) \cong GL(n, F)$  and therefore a linear group  $G \leq GL(V, F)$  can be thought as a group of invertible  $n \times n$  matrices over  $F$ . This elementary fact gave rise to a rich interplay between algebraical and geometrical ideas associated with such groups, as well as many applications inside and outside the theory of (finite dimensional) linear groups. The story of these groups goes back to the early years of the past century with the pioneer work of Burnside and Schur particularly. In fact one of the most famous previous results of finite dimensional linear groups (here used as a test for an abstract problem of the theory of groups) is the affirmative answer given by Schur to the general Burnside's problem for these type of groups.

**Theorem 1.1** ([49]). *A finitely generated finite dimensional linear group whose elements have finite order is finite.*

Thus, periodic implies locally finite for finite dimensional linear groups, although this is far from being true for arbitrary groups (see [43]).

Finite dimensional groups arise in group theory in a number of contexts. One of the most common is as the automorphism groups of certain abelian groups (Maltsev). Since the middle of the past century, the use of properties of linear groups in the theory of abstract groups was increasing, and nowadays the theory of finite dimensional linear groups is one of the most developed topics in mathematics and played a very important role in algebra and other branches of mathematics (see [6, 50, 51] and their references). Anyway, to give a more concrete idea of the most achievement results of the theory, we mention some of the most impressive results. We start quoting an standard result of Jordan on finite subgroups of finite dimensional linear groups in characteristic 0.

**Theorem 1.2** (C. Jordan: see [51]). *Let  $G \leq GL(n, F)$  be finite. If  $\text{char } F = 0$ , there is an integer-valued function  $\beta(n)$  such that  $G$  contains an abelian normal subgroup of finite index at most  $\beta(n)$ .*

Later on this result was extended by L. E. Dickson to prime characteristic (see [51, Theorems 9.3]), and by I. Schur to periodic groups in the following way.

**Theorem 1.3** ([49]). *Suppose  $\text{char } F = p$ . Then a periodic linear group  $G \leq GL(n, F)$  containing no elements of order  $p$  is abelian-by-finite.*

We mention that this is the abstract structure of these groups (see below). Actually the arithmetic structure of them is satisfactory as Platonov showed (see [51, Theorems 9.10 and 9.18]).

**Theorem 1.4** ([46]). *The Sylow subgroups of a periodic finite dimensional linear group  $G$  are conjugate and are conjugately complemented in  $G$ .*

They are also well behaved with respect to chain conditions (Brauer-Feit, Maltsev).

**Theorem 1.5** ([2, 37]). *Let  $G \leq GL(n, F)$  be a finite dimensional linear group.*

- (1) *If  $G$  is finitely generated (for example, if  $G$  satisfies Max, the maximal condition on subgroups), then  $G$  is residually finite. Further, if  $G$  is simple, then  $G$  is finite.*
- (2) *If  $G$  satisfies Min, the minimal condition on subgroups ( $G$  is periodic), then  $G$  is abelian-by-finite.*

One of the most achieved structural result on finite dimensional linear groups (which resembles the spectral theory of one automorphism) is a result due to Maltsev that gathers results due to Lie and Kolchin. This result, and this extensions based on results by Zassenhaus [56] says us that some generalized soluble finite dimensional linear groups do not differ too greatly from triangular matrix groups.

**Theorem 1.6** ([38]). *A soluble linear group  $G$  of degree  $n$  contains a triangularizable normal subgroup of finite index bounded by a function of  $n$ . In particular  $G$  is nilpotent-by-abelian-by-finite, that is  $G$  has a finite normal series*

$$\langle 1 \rangle \leq T \leq A \leq G$$

*such that  $T$  is nilpotent,  $A/T$  is abelian and  $G/A$  is finite.*

Actually locally soluble groups has the above structure.

**Theorem 1.7** ([56]). *A locally soluble finite dimensional linear group is soluble and then it is nilpotent-by-abelian-by-finite.*

We recall that a *radical group* is a group having an ascending series whose factors are locally nilpotent groups. Radical groups is a wide extension of both soluble and locally nilpotent groups. As a corollary of Theorem 1.7 is possible to show that a lot of generalized soluble finite dimensional groups are soluble (see [48, Corollary to Theorem 3.23]) and generalizing a famous result due to Plotkin [47, Theorem 13].

**Theorem 1.8** ([47]). *A radical finite dimensional linear group is soluble and then it is nilpotent-by-abelian-by-finite.*

Due to these last results, we considered the structure given in Theorems 1.7 and 1.8 something like the Theorem-type in our investigations.

## 1.2 Finitary linear groups

Until the current century, the systematic study of infinite dimensional linear groups was much more limited probably due the absence of fruitful approaches. One approach there consisted in the application of finiteness conditions to the study of infinite groups. One such restriction that has enjoyed considerable attention in linear groups is the notion of a *finitary linear group*. In the late 1980's, R.E. Phillips, J.I. Hall and others studied infinite dimensional linear groups under finiteness conditions, namely finitary linear groups (see [44, 15, 40, 45, 16, 17])). Inspired probably in *finitary permutation groups*, a finitary linear group is composed of transformations that stabilize all but finitely many vectors of a basis of an arbitrary vector space on what they act. Specifically, a linear group  $G \leq GL(V, F)$  is called *finitary* if, for each element  $g \in G$ , the subspace  $C_V(g)$  has finite codimension in  $V$ , that is  $\dim_F V/C_V(g)$  is finite; roughly speaking, a finitely generated finitary linear group behaves as a finite dimensional linear group, that is a finitary linear group looks like a locally (finite dimensional linear) group. The reader is referred to the above papers to see the type of results that were obtained. In particular, results near to the Theorem-type mentioned above have been showed, as for example the following result obtained by Meierfrankenfeld, Phillips and Puglisi [40].

**Theorem 1.9.** *A locally soluble finitary linear group is unipotent-by-abelian-by-locally finite.*

We recall that an element  $g \in G$  is said to be *unipotent* if 1 is the unique eigenvalue of  $g$ ; the group itself  $G$  is said to be unipotent if each one of its elements is unipotent. Finite dimensional unipotent linear groups are unitriangularizable and so they are nilpotent.

Theorem 3 is a good example of the effectiveness of finiteness conditions in the study of infinite dimensional linear groups. Actually, a finitary linear group can be viewed as the linear analogue of the abstract concept of an *FC*-group, that is a group with finite conjugacy classes; this association suggested that it was reasonable to start a systematic investigation of these "infinite dimensional linear groups" analogous to the fruitful study of finiteness conditions in infinite group theory in such a way that finitary linear groups were contained as a particular case.

## 2 The central dimension of a linear group

At the end of the past century, an idea to attack the study of infinite dimensional linear groups appeared. If  $G \leq GL(V, F)$ , then  $G$  acts trivially on the subspace

$$C_V(G) = \{v \in V \mid vg = v \text{ for all } g \in G\},$$

and hence  $G$  properly acts on the factor-space  $V/C_V(G)$ . Then *the central dimension of  $G$*  is defined to be the  $F$ -dimension of  $V/C_V(G)$  and denoted by  $\text{centdim}_F G$ . A linear group  $G$  is said to have *finite central dimension* if  $\text{centdim}_F G$  is finite; otherwise  $G$  is said to have *infinite central dimension*. Actually, a linear group  $G$  is *finitary if and only if  $\text{centdim}_F \langle g \rangle$  is finite for every  $g \in G$* .

At this point, it is worth mentioning that the above notion of central dimension of a linear group heavily relies in the way in which the linear group  $G$  is embedded in a *particular* general linear group. In fact, given an abstract group  $G$ , it is easy to construct embeddings of  $G$  in the same general linear group such that  $G$  has infinite or finite central dimension depending on the embedding (see [41])

**Example 1.** *Given a prime  $p$ , let  $A = \langle a_1 \rangle \times \langle a_2 \rangle \times \dots$  and  $B = \langle b_1 \rangle \times \langle b_2 \rangle \times \dots$  be two copies of the elementary abelian  $p$ -group. Then  $B$  acts on  $A$  as follows:*

$$\begin{cases} a_1 \cdot b_j = a_1 & j \geq 1 \\ a_{j+1} \cdot b_j = a_{j+1}a_1 & j+1 \geq 2 \\ a_k \cdot b_j = a_k & k \neq j+1 \end{cases}$$

We think of  $A$  as a vector space  $V$  over the prime field  $F_p$  of  $p$  elements and of  $B$  as a subgroup  $G$  of the general linear group  $GL(V, F)$ . We have that  $C_V(G) = \langle a_1 \rangle$  and hence  $G$  has infinite central dimension.

**Example 2.** As above, let  $B$  act on  $A$  as follows:

$$\begin{cases} a_1 \cdot b_j = a_1 a_{j+1} & j \geq 1 \\ a_k \cdot b_j = a_k & k \geq 2, j \geq 1 \end{cases}$$

Again we think of  $A$  as a vector space  $V$  on  $F_p$  and of  $B$  as a subgroup  $G$  of  $GL(V, F)$ . Since  $C_V(G) = \langle a_2 \rangle \times \langle a_3 \rangle \dots$ ,  $G$  has finite central dimension.

The above examples show that it is necessary to indicate that a linear group is a particular subgroup of a general linear group rather than an abstract group that can be *linearized* in some way. Even the effect of the embedding can be very different of the idea we can intuitively have. For example, we have.

**Example 3.** Let  $A = \langle a_1 \rangle \times \langle a_2 \rangle \times \langle a_3 \rangle \times \dots$  be an elementary abelian  $p$ -group,  $p$  a prime and  $G = \langle g \rangle$  be a cyclic group of order 2. We define an action of  $G$  on  $A$  as follows:

$$\begin{cases} a_{2j} \cdot g = a_{2j-1} & j \geq 1 \\ a_{2j-1} \cdot g = a_{2j} & j \geq 1 \end{cases}$$

Think of  $A$  as a vector space  $V$  over the field  $F_p$  of  $p$  elements and of  $G$  as a subgroup of  $GL(V, F_p)$ . In this example  $C_V(G) = \langle a_1 a_2 \rangle \times \langle a_3 a_4 \rangle \times \dots$  and so  $G$  has infinite central dimension.

Suppose that  $G$  has finite central dimension. If  $C = C_G(C_V(G))$ , then  $C$  is a normal subgroup of  $G$  and  $G/C$  is isomorphic to a subgroup of  $GL(n, F)$ , where  $n = \text{centdim}_F G$ . Since  $C$  stabilizes the series

$$\{0\} \leq C_V(G) \leq V,$$

we have that  $C$  is abelian. Moreover, if the characteristic of  $F$  is zero, then  $C$  is a torsion-free abelian group while if the characteristic of  $F$  is the prime  $p$   $C$  is an elementary abelian  $p$ -group (see [14, Corollary to Theorem 3.8] and [13, section 43] for these assertions). Therefore, the structure of the given group  $G$  can be determined by the structure of its factor-group  $G/C$ , which is an ordinary finite dimensional linear group. In other words, finite dimensional central linear groups behave as finite dimensional linear groups (or, more precisely, their structure can be deduced from that the ordinary case), so the efforts must be focused in infinite dimensional central linear groups.

In the late years, a fundamental approach was developed to study these groups, an approach explained, discussed and investigated in several universities and research centers, giving rise to an intensive programme of research involving mathematicians of different countries. This approach could be summarized as follows. Let  $\mathcal{L}_{icd}(G)$  be the set of all proper subgroups of  $G$  of infinite central dimension. In order to study infinite dimensional linear groups  $G$  that are close to finite dimensional, it is natural to proceed making  $\mathcal{L}_{icd}(G)$

*very small* in some sense. For example, by imposing some restrictions to  $\mathcal{L}_{icd}(G)$ . Given the big success that the study of infinite groups with finiteness conditions had enjoyed, it seemed reasonable to study linear groups with finiteness conditions in a similar way as the above. In this survey-paper we start by reviewing the approach to the study of a infinite dimensional central linear groups we carried out in these years. This approach is based on the use of different finiteness conditions, namely the different chain conditions. We should mention that, in the same time, other approaches making use of the central dimension have also been carried out. For example, in [9, 4, 5, 3], an study of linear groups such that every  $\mathcal{L}_{icd}(G)$ -subgroup has a finite (types of) ranks can be found while the description of linear groups with boundedly finite  $G$ -orbits or related conditions can be seen in [11, 12, 10].

### 3 Minimal and maximal conditions on subgroups of infinite central dimension

In the theory of infinite groups with finiteness conditions the first problems considered concerned with the maximal and minimal conditions, which were first developed in ring and module theory. K. A. Hirsch and S. N. Chernikov started the research of soluble groups with the maximal condition while Chernikov himself began the investigation of groups with the minimal condition (the *Chernikov groups* are close to the Burnside's problem: see [19]). In the early years connected with these problems we also found the celebrated problem of O. Yu. Schmidt on groups all of whose proper subgroups are finite (*minimal infinite groups*), as well as other minimal groups. The investigations which resulted from these problems led the further development of the theory of groups with finiteness conditions.

It is said that a family  $\mathcal{M}$  of subgroups of a given group  $G$  *satisfies the minimal condition* (or  $G$  *satisfies the minimal condition on  $\mathcal{M}$ -subgroups*) if given a descendant chain of  $\mathcal{M}$ -subgroups

$$H_1 \geq H_2 \geq H_3 \geq \cdots \geq H_n \geq H_{n+1} \geq \cdots,$$

then there exists some  $m \geq 1$  such that  $H_n = H_{n+1}$  for each  $n \geq m$ .  $\mathcal{M}$  *satisfies the maximal condition* (or  $G$  *satisfies the maximal condition on  $\mathcal{M}$ -subgroups*) if given an ascendant chain of  $\mathcal{M}$ -subgroups

$$H_1 \leq H_2 \leq H_3 \leq \cdots \leq H_n \leq H_{n+1} \leq \cdots,$$

then there exists some integer  $m \geq 1$  such that  $H_n = H_{n+1}$  for every  $n \geq m$ . When  $\mathcal{M}$  consists of all subgroups of  $G$ , we simply said that  $G$  *satisfies Min* or  $G$  *satisfies Max*, respectively.

Let  $G \leq GL(V, F)$  be a linear group. We say that  $G$  satisfies the minimal condition for subgroups of infinite central dimension, or  $G$  satisfies Min–icd, if the set  $\mathcal{L}_{icd}(G)$  satisfies the minimal condition. Similarly, we say that  $G$  satisfies the maximal condition for subgroups of infinite central dimension, or  $G$  satisfies Max–icd, if the set  $\mathcal{L}_{icd}(G)$  satisfies the maximal condition.

In the beginning the first questions raised in this framework were analogous to the first founding problems of Infinite Group Theory, namely to classify linear groups  $G \leq GL(V, F)$  under

- Schmidt’s Problem:  $\mathcal{L}_{icd}(G) = \emptyset$ .
- Chernikov’s Problem:  $\mathcal{L}_{icd}(G)$  satisfies the minimal condition or  $G$  satisfies Min–icd.
- Hirsch-Baer’s Problem:  $\mathcal{L}_{icd}(G)$  satisfies the maximal condition or  $G$  satisfies Max–icd.

In the late years these questions were successfully studied, and we review here the main results. Actually linear groups satisfying Min–icd were studied by Dixon, Evans and Kurdachenko in [7] while Kurdachenko and Subbotin gave a complete description of the structure of linear groups satisfying Max–icd in [35].

We first note that both conditions above are trivially satisfied if  $\mathcal{L}_{icd}(G) = \emptyset$ , the problem from O.Yu. Schmidt’s. In this case, we have an information that is very useful inside the theory.

**Theorem 3.1** ([7]). *If  $G \leq GL(V, F)$  is a (locally soluble)–by–finite subgroup of infinite central dimension whose proper subgroups have finite central dimension, then  $G$  is a Prüfer  $p$ –group, where  $p \neq \text{char } F$ .*

It is worth noting that there exists a connection among these groups, finitary linear groups and groups satisfying the chain conditions on all subgroups.

**Proposition 3.2** ([7, 35]). *Suppose that  $G \leq GL(V, F)$  is a linear group and  $\text{centdim}_F G$  is infinite.*

- (1) *If  $G$  satisfies Min–icd, then  $G$  is finitary or  $G$  satisfies Min.*
- (2) *If  $G$  satisfies Max–icd, then  $G$  is finitary or  $G$  is finitely generated.*

Concerning those groups that satisfy the minimal condition, we see that locally soluble groups are soluble and locally finite groups are soluble–by–finite (*virtually soluble*).

**Proposition 3.3** ([7]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be a linear group satisfying Min–icd,*

- (1) If  $G$  is locally soluble, then  $G$  is soluble.
- (2) If  $G$  is locally finite, then  $G$  is virtually soluble.

The main result of [7] classifies virtually soluble linear groups with Min–icd and gives a detailed structure of these groups. Of course this result fits in the terms of our theorem-type mentioned above.

**Theorem 3.4** ([7]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be a (locally soluble)-by-finite linear group. We suppose that  $G$  has infinite central dimension and satisfies Min–icd. Then either  $G$  is Chernikov or  $\text{char } F = p > 0$  and  $G$  has a normal series  $H \leq D \leq G$  such that:*

- (1)  $G/D$  is finite and  $D = H \times Q$  is the semidirect product of  $H$  by a non-trivial divisible Chernikov  $p'$ -subgroup of infinite central dimension  $Q$ ; and
- (2)  $H$  is a nilpotent bounded  $p$ -subgroup of finite central dimension satisfying the minimal condition on  $Q$ -invariant subgroups.

In particular,  $G$  is a nilpotent-by-abelian-by-finite group that satisfies Min–n, the minimal condition on its normal subgroups.

The description of linear groups with Max–icd is more complicated than those given above. We mention here a weak version of the structure theorems, and refer to [35] for a detailed version.

The case when the linear group  $G$  is *infinitely generated* (that is,  $G$  cannot finitely generated: see Section 5) is studied first. In this case, we note that  $G$  is finitary by Proposition 3.2.

**Theorem 3.5** ([35]). *Suppose that a linear group  $G \leq GL(V, F)$  is soluble, has infinite central dimension and satisfies Max–icd. If  $G/G'$  is infinitely generated, then  $G$  has a normal series*

$$1 \leq H \leq N \leq L \leq G$$

such that

- (1)  $L$  has finite index and infinite central dimension;
- (2)  $L/H$  is abelian,  $N/H$  is finitely generated,  $\text{centdim}_F N$  is finite and  $L/N \cong C_{q^\infty}$ , where  $q \neq \text{char } F$ ; and
- (3)  $H$  is a torsion-free nilpotent group if  $\text{char } F = 0$  and  $H$  is a nilpotent bounded  $p$ -subgroup if  $\text{char } F = p > 0$ .

In particular,  $G$  is nilpotent-by-abelian-by-finite.

The general description is achieved by the next result.

**Theorem 3.6** ([35]). *Suppose that the linear group  $G \leq GL(V, F)$  is soluble, has infinite central dimension and satisfies Max–icd. If  $G$  is infinitely generated, then  $G$  has a normal subgroup  $S$  of infinite central dimension such that  $G/S$  is a finitely generated abelian–by–finite group and  $S/S'$  is infinitely generated.*

Obviously, the structure of  $S$  is given by above Theorem 3.5 and, in particular,  $S$  is nilpotent–by–abelian–by–finite.

For the sequel, we shall make use of the following notion. Let  $G \leq GL(V, F)$ . Then

$$FD(G) = \{x \in G \mid \langle x \rangle \text{ has finite central dimension}\}$$

is clearly a normal subgroup of  $G$  ([7]). This subgroup is called the *finitary radical* of  $G$ , and will be very useful in what follows. We remark that finitely generated subgroups of  $FD(G)$  are finitary, that is  $FD(G)$  is *locally finitary*.

We quote now the results for finitely generated groups. They split into two cases depending of the central dimension of the finitary radical of the linear group considered.

**Theorem 3.7** ([35]). *Suppose that the linear group  $G \leq GL(V, F)$  is finitely generated soluble, has infinite central dimension and satisfies Max–icd. If the central dimension of  $FD(G)$  is finite, then  $G$  has a nilpotent normal subgroup  $U \leq FD(G)$  of finite central dimension such that*

- (1)  $G/U$  is polycyclic;
- (2)  $U$  is a torsion-free group if  $\text{char } F = 0$  and  $U$  is a bounded  $p$ –group if  $\text{char } F = p > 0$ ; and
- (3)  $U$  satisfies Max– $\langle g \rangle$  for every  $g \in G \setminus FD(G)$ .

In particular,  $G$  is nilpotent–by–polycyclic.

**Theorem 3.8** ([35]). *Suppose that the linear group  $G \leq GL(V, F)$  is finitely generated soluble, has infinite central dimension and satisfies Max–icd. If the central dimension of  $FD(G)$  is infinite, then  $G$  has a normal subgroup  $L \leq FD(G)$  of infinite central dimension such that*

- (1)  $G/L$  is abelian–by–finite and  $L/L'$  is infinitely generated; and
- (2)  $L$  satisfies Max– $\langle g \rangle$  for every  $g \in G \setminus FD(G)$ .

It follows that the complete structure of  $G$  is obtained applying Theorem 3.5 to  $L$ .

## 4 Weak minimal and weak maximal conditions on infinite central dimensional subgroups

The weak minimal and the weak maximal conditions were introduced simultaneously in 1968 by R. Baer [1] and D. I. Zaitsev [55] as the most natural generalization of the ordinary minimal and maximal conditions. We recall here the corresponding definitions.

Let  $G$  be a group and let  $\mathcal{M}$  be a family of subgroups of  $G$ . It is said that  $\mathcal{M}$  satisfies the weak minimal condition (or  $G$  satisfies the weak minimal condition on  $\mathcal{M}$ -subgroups) if given a descendant chain of  $\mathcal{M}$ -subgroups

$$H_1 \geq H_2 \geq H_3 \geq \cdots \geq H_n \geq H_{n+1} \geq \cdots ,$$

then there exists some integer  $m \geq 1$  such that the index  $|H_n : H_{n+1}|$  is finite for every integer  $n \geq m$ . Dually,  $\mathcal{M}$  satisfies the weak maximal condition (or  $G$  satisfies the weak maximal condition on  $\mathcal{M}$ -subgroups) if given an ascendant chain of  $\mathcal{M}$ -subgroups

$$H_1 \leq H_2 \leq H_3 \leq \cdots \leq H_n \leq H_{n+1} \leq \cdots ,$$

then there exists some integer  $m \geq 1$  such that the index  $|H_{n+1} : H_n|$  is finite for every integer  $n \geq m$ . The former problems, If the family  $\mathcal{M}$  is composed by all subgroups of  $G$ , it is said that  $G$  satisfies Wmin or  $G$  satisfies Wmax, respectively. After their already mentioned introduction as a topic within the Theory of Infinite Groups by Baer and Zaitsev, groups satisfying the weak minimal and the weak maximal conditions for several families of subgroups were successfully studied in many instances. For example, the weak chain conditions on normal subgroups ([21, 23, 24]), subnormal subgroups ([22]), non-normal subgroups ([25]) and non-subnormal subgroups ([31, 32]). The topic is now well developed and we refer to [36, Section 5.1] and [18] to obtain more information about it.

In the early years of the current century we learnt the research work done to classify linear groups infinite dimensional central linear groups  $G$  by imposing the ordinary chain conditions on the set  $\mathcal{L}_{icd}(G)$ . Having in mind the evolution of the ideas within the framework of the theory, it seemed that the natural step in this investigation was the imposing on the weak chain conditions on the mentioned set. This was the topic of the doctoral dissertation of Muñoz-Escalano in 2007 ([41]), which we developed since then.

The definitions are those one can expect. Let  $G \leq GL(V, F)$  be a linear group. We say that  $G$  satisfies the weak minimal condition for subgroups of infinite central dimension, or  $G$  satisfies Wmin-icd, if the set  $\mathcal{L}_{icd}(G)$  satisfies the weak minimal condition. Similarly, we say that  $G$  satisfies the weak maximal condition for subgroups of infinite central dimension, or  $G$  satisfies Wmax-icd, if the set  $\mathcal{L}_{icd}(G)$  satisfies the weak maximal condition. In the

memory [41], periodic linear groups satisfying the conditions Wmin–icd and Wmax–icd were characterized. Jointly with N. N. Semko from Kiev, co-adviser of the mentioned doctoral dissertation, Muñoz-Escalano and the author published the main results in [42], of which we give here a detailed reference.

We start by mentioning a result that extends Zassenhaus' theorem mentioned in Section 1.

**Proposition 4.1** ([42]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be a periodic linear group that either satisfies Wmin–icd or Wmax–icd. Then*

- (1) *If  $G$  is locally finite, then  $G$  is finitary or  $G$  is Chernikov.*
- (2) *If  $G$  is locally soluble, then  $G$  is soluble.*

*In particular, periodic locally soluble non-Chernikov linear groups satisfying Wmin–icd or Wmax–icd are soluble finitary linear groups.*

The main result of [42] is the following theorem that describes completely such groups.

**Theorem 4.2** ([42]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be a periodic locally soluble linear group of infinite central dimension satisfying either Wmin–icd or Wmax–icd. Then the following properties hold:*

- (1) *If  $\text{char } F = 0$ , then  $G$  is Chernikov; and*
- (2) *If  $\text{char } F = p > 0$ , then either  $G$  is Chernikov or  $G$  has a series of normal subgroups  $H \leq D \leq G$  satisfying the following conditions:*
  - (2a)  *$H$  is a nilpotent bounded  $p$ -subgroup whose central dimension is finite;*
  - (2b)  *$D$  has finite index and it is a semidirect product  $D = H \rtimes Q$ , where  $Q$  is a Chernikov divisible  $p'$ -group whose central dimension is infinite; and*
  - (2c) *if  $K$  is a Prüfer  $q$ -subgroup of  $Q$  and  $\text{centdim}_F K$  is finite, then  $H$  has a finite  $K$ -composition series.*

With some extra work, the above results at once allow us to deduce the following consequences.

**Corollary 4.3** ([42]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be a periodic locally soluble linear group of infinite central dimension. Then the following conditions are equivalent.*

- (1)  *$G$  satisfies Wmin–icd;*
- (2)  *$G$  satisfies Wmax–icd; and*

(3)  $G$  satisfies Min–icd.

Moreover, if  $G$  is a periodic locally nilpotent group and one of these conditions holds then  $G$  is Chernikov.

For abstract groups, Baer [1] and Zaitsev [55] had already established in a rather easy way that the conditions Wmin and Wmax were equivalent for soluble groups (more general for (locally soluble)–by–finite groups) and even equivalent to *minimax* groups: see [36, 5.1.5]. We recall here that a group is called *minimax* if it has a subnormal series whose factors either satisfy Min or Max; see [48, 36].

Until now we do not know of a proof of Corollary 4.3 without using the classification’s results mentioned above of the infinite central dimensional linear groups satisfying Min–icd, Wmin–icd or Wmx–icd.

A fairly consequence from the definitions and from Corollary 4.3 is the following property that has no analogue for abstract groups.

**Corollary 4.4** ([42]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be a periodic locally soluble linear group of infinite central dimension. If  $G$  satisfies Max–icd, then  $G$  satisfies Min–icd.*

For non-periodic groups the situation was more complicated and it was impossible to obtain results as the previous ones. We began this study in the doctoral dissertation by Muñoz-Escalano [41] dealing first with nilpotent groups. Later on, a systematic study of locally nilpotent linear groups satisfying Wmin–icd and Wmax–icd was the topic of the papers [27] and [29], and we collect here the main results.

The first result we quote shows that for nilpotent linear groups the weak chain conditions on subgroups of infinite central dimensional and the weak chain conditions on subgroups are equivalent.

**Theorem 4.5** ([27]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be a nilpotent linear group of infinite central dimension that either satisfies Wmin–icd or Wmax–icd. Then  $G$  is minimax.*

Other results of [27] were deduced in characteristic prime only since the tools needed to proceed in characteristic zero were rather different. We denote by  $t(G)$  the torsion subgroup of the locally nilpotent group  $G$ , by  $G^{\mathfrak{F}}$  the finite residual of  $G$  (the intersection of all subgroups of  $G$  of finite index), and by  $G^{\mathfrak{N}}$  the nilpotent residual of  $G$  (the intersection of all normal subgroups  $H$  of  $G$  such that  $G/H$  is nilpotent). By means of these characteristic subgroups we have the following result.

**Theorem 4.6** ([27]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be a locally nilpotent linear group of infinite central dimension that either satisfies Wmin–icd or Wmax–icd. Suppose that  $\text{char } F = p > 0$ . Then*

- (1)  $G/t(G)$  is minimax;
- (2)  $G/G^{\mathfrak{F}}$  is nilpotent minimax; and
- (3)  $G/G^{\mathfrak{N}}$  is minimax.

In particular, if  $t(G)$  has infinite central dimension, then  $G$  itself is minimax.

For linear groups that satisfies the weak minimal condition Wmin-icd something more can be said.

**Theorem 4.7** ([29]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be an infinite central dimensional linear group that satisfies Wmin-icd.*

(1) *If  $G$  is locally nilpotent, then  $G$  either is minimax or finitary.*

(2) *If  $G$  is hypercentral and  $\text{char } F = p > 0$ , then  $G$  is minimax.*

Similar results for the condition Wmax-icd are false. Indeed in [29, Section 4], an example of a hypercentral linear group satisfying Wmax-icd, which is neither minimax nor finitary was constructed.

#### Example 4.

Let  $F$  be a field of  $\text{char } F = p > 0$ . We consider a countably infinite dimensional  $F$ -vector space  $V$ . Let  $\{u, v_n | n \in \mathbb{N}\}$  be a basis of  $V$ . Thus

$$V = uF \oplus v_1F \oplus v_2F \oplus \cdots \oplus v_nF \oplus \cdots = uF \oplus \left( \bigoplus_{n \in \mathbb{N}} v_nF \right)$$

Let  $GL(\mathbb{N}, F)$  be the set of infinite matrices such that there are only finitely non-zero entries in each row and every column. Then we may define the product of two of such matrices by the same rule as finite dimensional matrices. Let  $\gamma = \|c_{jk}\|_{j,k \in \mathbb{N}}$  be an infinite matrix where

$$\begin{cases} c_{11} = c_{12} = 1 \\ c_{22} = 1 \\ c_{j,j-1} = c_{jj} = 1 & \text{whenever } j \geq 3; \\ c_{jk} = 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

We define also the matrices  $\alpha_n = \|a_{jk}^{(n)}\|_{j,k \in \mathbb{N}}, n \in \mathbb{N}$  such that

$$\begin{cases} a_{jj}^{(n)} = 1 & \text{for all } n \in \mathbb{N}, \\ a_{1n+1}^{(n)} = 1 \\ a_{jk}^{(n)} = 0 & \text{for all remaining pairs } (j, k) \end{cases}$$

An straightforward computation gives that

- $\gamma$  has infinite order;
- $\alpha_n$  has order  $p$ , for every  $n \in \mathbb{N}$ ;
- $\alpha_n\alpha_m = \alpha_m\alpha_n$ , for every  $n, m \in \mathbb{N}$ ;
- $\gamma^{-1}\alpha_n\gamma = \alpha_n\alpha_{n-1}$ , for every  $n \in \mathbb{N}$

Let  $G = \langle \gamma, \alpha_n \mid n \in \mathbb{N} \rangle$ . Then  $G = A \rtimes \langle \gamma \rangle$  where  $A = \text{Dr}_{n \in \mathbb{N}} \langle \alpha_n \rangle$  is an infinite elementary abelian  $p$ -subgroup. Moreover,  $G$  is hypercentral.

From now on we shall freely make use of concepts related in the book [30]. If we consider  $A$  as an  $\mathbb{F}_p\langle \gamma \rangle$ -module, then it readily follows that  $A$  is a  $P$ -module over the ring  $\mathbb{F}_p\langle \gamma \rangle$  where  $P = (\gamma - 1)\mathbb{F}_p\langle \gamma \rangle$ . Moreover it is not hard to see that  $A$  is a Prüfer  $P$ -module. By construction,  $C_V(A) = \bigoplus_{n \in \mathbb{N}} v_n F$ , so that  $\dim_F(V/C_V(A)) = 1$  and  $A$  has finite central dimension. Furthermore,  $C_V(\langle \gamma \rangle) = v_1 F + (u - v_2)F$ , so that  $\text{centdim}_F \langle \gamma \rangle$  is infinite. In conclusion,  $\text{centdim}_F G$  is infinite.

Finally, we claim that  $G$  satisfies Wmax-icd. Let

$$H_1 \leq H_2 \leq \cdots \leq H_n \leq \cdots$$

be an ascending chain of subgroups such that the indexes  $|H_{j+1} : H_j|$  are infinite for all  $j \in \mathbb{N}$ . If  $H_j \leq A$ , then  $\text{centdim}_F H_j$  is finite. So, we can suppose that  $H_1$  does not lie in  $A$ . We have  $H_1 = (H_1 \cap A)\langle x \rangle$  where  $x = \gamma^{m_1}\beta$  for some  $\beta \in A$ . For the positive integer  $m_1$ , we have a decomposition  $m_1 = p^{k_1}q_1$  where  $(p, q_1) = 1$ . Put  $s_1 = p^{k_1}$  and choose  $\delta = \gamma^{s_1}$ . By construction, the  $\mathbb{F}_p\langle \gamma \rangle$ -module  $A$  is artinian and  $[A, \gamma] = A$  or in additive notation,  $A(\gamma - 1) = A$ . The finiteness of index  $|\langle \gamma \rangle : \langle \delta \rangle|$  implies that  $A$  is an artinian  $\mathbb{F}_p\langle \delta \rangle$ -module (see [30, Theorem 5.2]). Since  $A$  is an elementary abelian  $p$ -group, for every  $\alpha \in A$  we have

$$\alpha(\delta - 1) = \alpha(\gamma^{s_1} - 1) = \alpha(\gamma - 1)^{s_1}$$

It follows that  $A(\delta - 1) = A$ . Then, by [30, Corollary 5.2],

$$A = C_1 \oplus C_2 \oplus \cdots \oplus C_t$$

where  $C_j$  is a Prüfer  $R$ -module where  $R = (\delta - 1)\mathbb{F}_p\langle \delta \rangle$ ,  $1 \leq j \leq t$ . Without loss of generality, we can suppose that

$$H_1 \cap A = C_1 \oplus C_2 \oplus \cdots \oplus C_{r_1} \oplus D_1$$

where  $D_1$  is finite and  $\dim_{\mathbb{F}_p} \Omega_1(D_1) + r_1 \leq t$ . We can suppose that

$$H_2 \cap A = C_1 \oplus C_2 \oplus \cdots \oplus C_{r_2} \oplus D_2$$

here  $D_2$  is finite and  $\dim_{\mathbb{F}_p} \Omega_1(D_2) + r_2 \leq t$ . Since the index  $|H_2 : H_1|$  is infinite and  $|H_2 A : H_1 A|$  is finite, the index  $|H_2 \cap A : H_1 \cap A|$  is infinite. It follows that  $r_2 > r_1$ . Proceeding in a similar way, we obtain that after finitely many steps the chain of subgroups  $\{H_n \mid n \in \mathbb{N}\}$  breaks off so that  $G$  satisfies Wmax–icd. Since the periodic part of  $G$  is an infinite  $p$ –elementary abelian group,  $G$  is not minimax.

We realized that other extensions of these results to generalized soluble groups could be very difficult to deal with. However we were able to study soluble linear groups that either satisfy Wmin–icd or Wmax–icd in [28]. One more time, we found that the structure of these groups is rather like the structure of finite dimensional soluble groups, as the main result from [28] shows. We note that an element  $x \in G \leq GL(V, F)$  is *unipotent* if there exists some  $n \in \mathbb{N}$  such that  $V(x - 1)^n = 0$ . A subgroup  $H$  of  $G$  is called *unipotent* if every element  $x \in H$  is unipotent and *boundedly unipotent* if  $n$  is independent of  $x$ .

**Theorem 4.8** ([28]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be a soluble infinite central dimensional linear group that either satisfies Wmin–icd or Wmax–icd. Then either  $G$  is minimax or  $G$  satisfies the following conditions:*

- (1)  *$G$  has a boundedly unipotent normal subgroup  $L$  of finite central dimension such that  $G/L$  is minimax;*
- (2)  *$L$  is a torsion-free nilpotent subgroup if  $\text{char } F = 0$ ; and*
- (3)  *$L$  is a bounded nilpotent  $p$ –subgroup if  $\text{char } F = p > 0$ .*

For the weak minimal condition Wmin–icd we were able to say something more in a similar way to the locally nilpotent case.

**Theorem 4.9** ([28]). *If  $G \leq GL(V, F)$  is a soluble infinite central dimensional linear group that satisfies Wmin–icd, then  $G$  is either minimax or finitary.*

We mention that non-minimax soluble finitary linear groups satisfying Min–icd (hence Wmin–icd) have been constructed (see [7, Section 5]). Also, it is rather easy to construct non-finitary minimax soluble linear groups. On the other hand, analogous results to above for the weak maximal condition are not true. In fact, the example mentioned above ([29, Section 4]) is a metabelian linear group satisfying Wmax–icd which is neither minimax nor finitary.

Summing up, our next result collects the equivalence of the weak chain conditions on linear groups finishing this description.

**Corollary 4.10.** *Let  $G \leq GL(V, F)$  an infinite central dimensional linear group. Suppose that  $G$  is*

- (a) locally nilpotent non-finitary; or
- (b) soluble non-finitary; or
- (c) hypercentral, being  $\text{char } F = p > 0$ .

Then the following assertions are equivalent

- (1)  $G$  satisfies  $W\text{min-}icd$ ,
- (2)  $G$  satisfies  $W\text{min}$ ,
- (3)  $G$  satisfies  $W\text{max}$ ,
- (4)  $G$  is minimax

Moreover, if  $G$  is nilpotent, then the conditions are also equivalent to the weak maximal condition on subgroups of infinite central dimension  $W\text{max-}icd$ .

#### 4.1 Appendix: Linear groups admitting an infinite central deviation

At the beginning of this investigation, we did not suspect that the two weak chain conditions on the set of infinite central dimensional subgroups  $\mathcal{L}_{icd}(G)$  of a linear group  $G$  would become equivalent as they would in many cases (corollaries 4.3 and 4.10). Having in mind the different structural results obtained in the study of the ordinary chain conditions ([7, 35]), we started the research of the weak chain conditions considering first the weak minimal condition, leaving the study of the weak maximal condition as a second step. Very soon we realized that most of the proofs were similar and seemed to depend on the imposition to  $\mathcal{L}_{icd}(G)$  of a more general finiteness condition, from which the mentioned chain conditions were a particular case. Our attempts tried to deal with chains having ascending or descending steps at the same time as it occurs in the weak chain conditions themselves. Later on groups with a deviation for non-subnormal subgroups were introduced and classified for small values (see [33, 33]).

At this point, to describe appropriately the found setting, a highlighting idea was to proceed imitating concepts and trends from the theory of noncommutative rings, concretely the way in which some types of rings generalizing artinian and noetherian rings (rings with *Krull dimension*) were constructed. A fundamental remark here is to note that for noncommutative rings the Krull dimension is measured on the lattice of right ideals instead of the maximal length of a chain of prime ideals.

Let  $A = (A, \leq)$  be a partially ordered set. If  $a, b \in A$ , then we put

$$[a, b] = \{x \in A \mid a \leq x \leq b\}.$$

This subset  $[a, b]$  is called the *closed interval* with ends  $a$  and  $b$ . By definition *the deviation of  $A$* ,  $\text{dev}(A)$  for short, is given by the following rule: If  $A$  is trivial, then put  $\text{dev}(A) = -\infty$ . If  $A$  is nontrivial but satisfies the minimal condition, then  $\text{dev}(A) = 0$ . For a general ordinal  $\alpha$ , we define  $\text{dev}(A) = \alpha$  provided:

- (i)  $\text{dev}(A) \neq \beta < \alpha$ ;
- (ii) in any descending chain  $a_1 \geq a_2 \geq \dots \geq a_n \geq \dots$  of elements of  $A$  all but finitely many closed intervals  $[a_{n+1}, a_n]$  have deviation less than  $\alpha$ .

Clearly  $\text{dev}(A)$  cannot exist for an arbitrary partially ordered set. By definition, every partially ordered set satisfying the minimal condition has a deviation. On the other hand, if the partially ordered set satisfies the maximal condition, then it also has a deviation (see [39, 1.8]). Therefore, the imposition of the existence of a deviation is a generalization of both the condition minimal and the condition maximal. As we mentioned above, in the Theory of Rings, deviations were introduced to define interesting types of rings. In fact, for each ring  $R$ , one considers the partially ordered set by inclusion of all right ideals of  $R$ . If this set admits a deviation, it is said that  $R$  has Krull dimension. Hence the rings with Krull dimension are a generalization of both artinian and noetherian rings.

We applied the same idea to linear groups. Let  $G \leq GL(V, F)$ . Then  $\mathcal{L}_{icd}(G)$  is a partially ordered set by inclusion. The deviation of the poset  $\mathcal{L}_{icd}(G)$  is called *the infinite dimensional deviation* of  $G$  and is denoted by  $\text{dev}_{icd}(G)$ . If  $G$  satisfies Min–icd, then  $\text{dev}_{icd}(G) = 0$ . As we mentioned before, the groups satisfying Max–icd also have an infinite dimensional deviation. On the other hand, if  $G$  satisfies Wmin–icd then  $\text{dev}_{icd}(G) = 1$ , and if  $G$  satisfies Wmax–icd then there exists an infinite dimensional deviation  $\text{dev}_{icd}(G)$ . Therefore the existence of an infinite dimensional deviation generalizes the verification of one of the ordinary chain or weak chain conditions.

We succeed in studying the condition  $\text{dev}_{icd}(G) = 1$ , as we were able to show satisfactory results as the following ones.

**Theorem 4.11.** *Let  $G$  be a soluble subgroup of  $GL(V, F)$  with  $\text{dev}_{id}(G) = 1$ . If  $\text{char } F = 0$ , then  $G$  either is finitary or minimax.*

**Theorem 4.12.** *Let  $G$  be a soluble subgroup of  $GL(V, F)$  with  $\text{dev}_{id}(G) = 1$ . Suppose that  $\text{char } F = p > 0$  and  $G$  further satisfies one of the following conditions:*

- (a)  $G$  has infinite central dimension and has virtually finite central dimension; or
- (b)  $G$  is neither finitary nor has virtually finite central dimension.

*Then  $G$  has a normal subgroup  $H$  such that  $H$  is a nilpotent bounded  $p$ -group,  $G/H$  is abelian–by–finite minimax and  $H$  satisfies Min– $\langle g \rangle$  for every element  $g \in G \setminus FD(G)$ . In particular  $G$  is nilpotent–by–abelian–by–finite.*

Later on, we were able to show a general result in describing the structure of a soluble linear group admitting an infinite dimensional deviation in the following way.

**Theorem 4.13.** *Let  $G$  be a soluble subgroup of  $GL(V, F)$  and suppose that  $\text{dev}_{icd}(G)$  exists. If  $G$  has infinite central dimension, then  $G$  either has virtually finite central dimensional or  $G$  has a finite series of normal subgroups*

$$H \leq T \leq L \leq G$$

such that

- (1)  $G/L$  is a finitely generated abelian-by-finite group;
- (2)  $L/T$  is a torsion-free nilpotent minimax group;
- (3)  $T/H$  is a divisible Chernikov group;
- (4)  $L/H$  is nilpotent minimax; and
- (5)  $H$  is a nilpotent subgroup of finite central dimension.

The next ones were results obtained making use of rather different technics, which arose from that we call *local methods*. These results complement those quoted above.

**Theorem 4.14.** *Let  $G$  be a soluble subgroup of  $GL(V, F)$  and suppose that  $\text{dev}_{icd}(G)$  exists. If  $G$  has infinite central dimension and has virtually finite central dimensional, then  $G$  has a normal subgroup  $H$  such that  $H$  is nilpotent  $\langle g \rangle$ -minimax for every  $g \in G \setminus FD(G)$ , and  $G/H$  is abelian-by-finite minimax.*

**Theorem 4.15.** *Let  $G$  be a soluble subgroup of  $GL(V, F)$  and suppose that  $\text{dev}_{icd}(G)$  exists. If  $G$  is neither finitary nor has virtually finite central dimensional, then  $G$  has a normal subgroup  $H$  such that  $H$  is nilpotent of finite central dimension and  $\langle g \rangle$ -minimax for every  $g \in G \setminus FD(G)$ , and  $G/H$  is minimax.*

Note that  $G$  is nilpotent-by-abelian-finite and nilpotent-by-minimax, respectively. Moreover, in both results, the nilpotent normal subgroup  $H$  is a stability group of a finite series and becomes to be torsion-free if  $\text{char } F = 0$  and a bounded  $p$ -group if  $\text{char } F = p > 0$ .

Despite of these goals we were unable to construct specific examples of infinite central dimensional linear groups having an infinite central deviation that did not satisfy one of the weak chain conditions Wmax-icd or Wmin-icd. That is the reason why we decided to leave this direction of research and to focus in the investigation of the two conditions at the same time, as we described in the first part of this Section, founding that most of the proofs were similar (specially in the periodic case). However, up now, the following problem remains open.

QUESTION *Is there a linear group  $G$  admitting an infinite dimensional deviation that does not satisfy the weak maximal condition  $W\text{max-}icd$  nor the weak minimal condition  $W\text{min-}icd$ ?*

## 5 Augmentation dimension: antifinitary linear groups

Though this work is strongly focused on the research done with occasion of the doctoral dissertation of Muñoz-Escalano [41], whose basic tool is the central dimension, our first approach to infinite dimensional linear groups was rather different since at first we wanted to find the dual concept of finitary group (see below). Having in mind the idea of proceeding through the finiteness conditions, it seemed to us that the concept of finitary group was close to the concept of an  $FC$ -group and then it could be imitated better making use of the definition of *the augmentation dimension* of a linear group as it appeared in other papers. We recall the definitions. Let  $G \leq GL(V, F)$  be a linear group that acts on a vector space  $V$  over a field  $F$ . We consider *the group ring of  $G$  over  $F$* , that is the ring

$$FG = \left\{ \sum_{g \in G} t_g g \mid g \in G, t_g \in F, t_g = 0 \text{ for all but finitely many } g \in G \right\}$$

whose multiplication is induced by that of  $G$ . We look at the corresponding augmentation ideal  $\omega FG = \langle g - 1 \mid g \in G \rangle$  and the subspace of  $G$  generated by it,  $V(\omega FG)$ . Then it is clear that  $G$  acts trivially on the factor-space  $V/V(\omega FG)$ , and hence  $G$  properly acts on the subspace  $V(\omega FG)$ . As in [8], the *augmentation dimension* of  $G$  is defined to be the  $F$ -dimension of  $V(\omega FG)$  and is denoted by  $\text{augdim}_F G$ .

The study of finite augmentation dimensional linear groups can be reduced to the study of finite dimensional linear groups, just as it happens for finite central dimensional linear groups. Suppose that  $G$  has finite augmentation dimension, that is  $V(\omega FG)$  is finite dimensional. Put  $C = C_G(V(\omega FG))$ . Clearly,  $C$  is a normal subgroup of  $G$  and  $G/C$  is isomorphic to a subgroup of  $GL(n, F)$ , where  $n = \text{augdim}_F G$ . Each element of  $C$  acts trivially in every factor of the series

$$\{0\} \leq V(\omega FG) \leq V,$$

so that  $C$  is abelian, torsion-free if the characteristic of  $F$  is zero and an elementary abelian  $p$ -subgroup if the characteristic of  $F$  is the prime  $p$ . Therefore the structure of  $G$  can be determined by the structure of  $G/C$ , which is an ordinary finite dimensional linear group. As in the past sections, we must pay attention to the set  $\mathcal{L}_{iad}(G)$  of all proper subgroups of  $G$  having infinite augmentation dimension. This concept was introduced in [8]. Later on, linear groups with some rank restrictions on the same subgroups were studied ([5, 3]).

Though the concept of augmentation dimension resembles to be opposite of the concept of central dimension, there is an apparently strong relationship between them. In fact  $\dim_F V/C_V(g)) = \dim_F V(g - 1)$  for  $g \in GL(V, F)$ . More generally, if  $G \leq GL(V, F)$  is finitely generated, then it is easy to see that the finiteness of one of the dimensions implies the finiteness of the other. However, in the general case, this does not hold as the following specific examples show.

**Example 5.** Let  $V$  and  $G$  as in Example 1. Since  $C_V(G) = \langle a_1 \rangle = V(\omega(F_p G))$ , we have that  $G$  has infinite central dimension and finite augmentation dimension.

**Example 6.** Let  $V$  and  $G$  as in Example 2. In this case  $C_V(G) = \langle a_2 \rangle \times \langle a_3 \rangle \times = V(\omega F_p G)$ , and so  $G$  has finite central dimension and infinite augmentation dimension.

Despite of these examples, in [20], more conditions over  $G$  such that the finiteness of  $\text{centdim}_F G$  implies the finiteness of  $\text{augdim}_F G$  are established. Given a prime  $p$ , it is said that an abstract group  $G$  has *finite factor p-rank r* (respectively, *finite factor 0-rank r*) if whenever  $U$  and  $V$  are normal subgroups of  $G$  such that  $V/U$  is an abelian  $p$ -group (respectively, torsion-free abelian) and  $H$  is an intermediate subgroup  $U \leq H \leq V$  such that  $H/U$  is finitely generated, then the minimal number of elements required to generate  $H/U$  is less or equal to  $r$ , and  $r$  is the least such integer with this property.

**Theorem 5.1** ([20]). *Let  $G$  be a locally soluble subgroup of  $GL(V, F)$  such that  $\text{char } F = p \geq 0$ . Suppose that  $G$  has finite factor p-rank. If  $\text{centdim}_F G$  is finite, then so is  $\text{augdim}_F G$ .*

**Theorem 5.2** ([20]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be periodic and let  $\text{char } F = p > 0$ . Suppose that  $G$  has an ascending series of normal subgroups such that every factor either is a  $p$ -group or a  $p'$ -group, and there is an integer  $r$  such that every finitely generated  $p$ -subgroup of  $G$  can be generated by  $r$  elements. If  $\text{centdim}_F G$  is finite, then so is  $\text{augdim}_F G$ .*

As mentioned, our approach to the study of infinite dimensional linear groups wanted to be based on the influence of the family of the subgroups having finite augmentation dimension on the structure of the whole linear group. For example, if every proper subgroup of a locally soluble linear group  $G$  has finite augmentation dimension, in [8] it was established that  $G$  is a Prüfer  $p$ -group for some prime  $p$ . On the contrary, if  $G$  has no subgroups of finite augmentation dimension, we have not information about the structure of  $G$ . As an exception, we should mention the cofinitary linear groups. A subgroup  $G$  of  $GL(V, F)$  is called *cofinitary* if, for each element  $g \in G$ , the subspace  $V(g - 1) = [V, g]$  generated by all elements of the form  $v(g - 1)$ ,  $v \in V$ , has finite codimension in  $V$ . These groups were considered by B. A. F. Wehrfritz [52, 53, 54]. This is the dual concept of a finitary linear group since a subgroup  $G$  of  $GL(V, F)$  is *finitary* if, for each element  $g \in G$ , the subspace  $V(g - 1)$  has finite dimension in  $V$ .

Every finitely generated subgroup of a finitary linear group has finite augmentation dimension, that is, as we mentioned above, finitary linear groups are locally finite dimensional in some sense. It is worth to mention that very often the structure of groups satisfying locally a property  $\mathcal{P}$  is very different of that of the groups having the property  $\mathcal{P}$ . Therefore it is interesting to consider linear groups, in which the family of subgroups of finite augmentation dimension is bigger. Recall that a subgroup  $H$  of an arbitrary group  $G$  is called *infinitely generated* if  $H$  cannot have a finite set of generators. In almost all groups (with the exception of noetherian groups), the family of infinitely generated subgroups is bigger than that of finitely generated subgroups. We say that a group  $G \leq GL(V, F)$  is *an anfinitary linear group* if each proper infinitely generated subgroup of  $G$  has finite augmentation dimension. Note that these groups are the antipodes of finitary linear groups. These groups were our first goal and were carefully studied in [26] (A paper accepted for publication in 2006 that appeared in 2008 due to inner problems of the journal).

The description of the main results of [26] is the aim of the current Section. We first noticed that the study had to be focused on non-finitary antifinitary linear groups because of the next result.

**Theorem 5.3** ([8]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be a (locally soluble)–by–finite linear group of infinite augmentation dimension such that every proper subgroup has finite augmentation dimension. Then  $G$  is a Prüfer  $p$ –group, where  $p \neq \text{char } F$ .*

In particular, this happens if  $G$  is (locally soluble)–by–finite finitary and an antifinitary linear group of infinite central dimension. For,  $\mathcal{L}_{iac}(G) = \emptyset$  and it suffices to apply Theorem 5.3. Another interesting fact about locally finite antifinitary linear groups is the following result.

**Proposition 5.4** ([26]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be a locally finite antifinitary linear group. Then  $G$  either is finitary or Chernikov.*

After these preliminary results, we planned the study of antifinitary linear groups splitting it in two natural cases depending on whether or not the group considered was finitely generated. For infinitely generated groups, we were able to establish the following description.

**Proposition 5.5** ([26]). *Let  $G \leq GL(V, F)$  be an infinitely generated locally generalized radical antifinitary linear group. Then  $G$  either is finitary or locally finite.*

Here we recall that a group  $G$  is said to be *generalized radical* if  $G$  has an ascending series whose factors are locally nilpotent or locally finite. Proposition 5.4 and Proposition 5.5 at once ensure us that an infinitely generated antifinitary linear group  $G$  that is locally generalized radical is Chernikov. Even more, we have the following detailed description.

**Theorem 5.6** ([26]). *Let  $G$  be an infinitely generated locally generalized radical antifinitary subgroup of  $GL(V, F)$  such that  $G \neq FD(G)$ .*

- (1) *If  $G/FD(G)$  is infinitely generated, then  $G$  is a Prüfer  $p$ -group for some prime  $p$ .*
- (2) *If  $G/FD(G)$  is finitely generated, then  $G = K\langle g \rangle$  satisfies the following conditions:*
  - (2a)  *$K$  is a divisible abelian Chernikov normal  $q$ -subgroup of  $G$ , for some prime  $q$*
  - (2b)  *$g$  is a  $p$ -element, where  $p$  is a prime such that  $p = |G/FD(G)|$ ;*
  - (2c)  *$K$  is  $G$ -divisibly irreducible, i.e.  $K$  has no proper  $G$ -invariant subgroups;*
  - (2d) *if  $q = p$ , then  $K$  has finite special rank equal to  $p^{m-1}(p-1)$  where  $p^m = |\langle g \rangle/C_{\langle g \rangle}(K)|$ ; and*
  - (2e) *if  $q \neq p$ , then  $K$  has finite special rank  $o(q, p^m)$  where as above  $p^m = |\langle g \rangle/C_{\langle g \rangle}(K)|$  and  $o(q, p^m)$  is the order of  $q$  modulo  $p^m$ .*

In particular  $G$  is abelian-by-finite.

On the other hand, we were able to characterize finitely generated antifinitary linear groups as follows.

**Theorem 5.7** ([26]). *Let  $G$  be a finitely generated radical antifinitary subgroup of  $GL(V, F)$ . If  $G$  has infinite augmentation dimension, then the following conditions holds:*

- (1)  *$\text{augdim}_FFD(G)$  is finite;*
- (2)  *$G$  has a normal subgroup  $U$  such that  $G/U$  is polycyclic;*
- (3)  *$U$  is boundedly unipotent and, in particular,  $U$  is nilpotent;*
- (4)  *$U$  is torsion-free if  $\text{char } F = 0$  and is a bounded  $p$ -subgroup if  $\text{char } F = p > 0$ ; and*
- (5) *if  $\langle 1 \rangle = Z_0 \leq Z_1 \leq \dots \leq Z_m = U$  is the upper central series of  $U$ , then the factors  $Z_1/Z_0, \dots, Z_m/Z_{m-1}$  are finitely generated  $\mathbb{Z}\langle g \rangle$ -modules for each element  $g \in G \setminus FD(G)$ . In particular  $U$  satisfies the maximal condition on  $\langle g \rangle$ -invariant subgroups ( $\text{Max-}\langle g \rangle$ ) for every  $g \in G \setminus FD(G)$ .*

In particular  $G$  is nilpotent-by-polycyclic.

## Acknowledgements

This research was supported by Proyecto MTM2010-19938-C03-03 of Dirección General de Investigación of MICINN (Spain). I also am very grateful to the University of Zaragoza (Spain) for the support given through specific grants and all the help I have received in some difficult years for me. I wish to express my deep gratitude to my colleagues and good friends Leonid A. Kurdachenko from Dnepropetrovsk (Ukraine) and Nikolaj N. Semko from Kiev (Ukraine), who shared with me this research and its related ideas for more than one decade. Special thanks are due to José M. Muñoz-Escalano, (*the scholar fellow*), a former graduate student of mine. For me, it was a great pleasure to be the advisor of his doctoral dissertation and to carry out this common investigation, whose more outstanding results are contained in this survey.

## References

- [1] R. Baer, Polymimaxgruppen, Math. Ann. 175, 1-43, 1968.
- [2] R. Brauer, W. Feit, An analog of Jordan's Theorem in characteristic  $p$ , Ann. Math. 84, 119-131, 1966.
- [3] O. Yu. Dashkova, Infinite-dimensional linear groups with restrictions on subgroups that are not soluble  $A_3$ -groups, Algebra and Logic 46, 297-302, 2007.
- [4] O. Yu. Dashkova, M. R. Dixon, L. A. Kurdachenko, Linear groups with rank restrictions on the subgroups of infinite central dimension, J. Pure Appl. Algebra 208, 785-795, 2006.
- [5] O. Yu. Dashkova, M. R. Dixon, L. A. Kurdachenko, Infinite dimensional linear groups with the restriction on the subgroups of infinite ranks, Izv. Gomel University 3, 109-123, 2006.
- [6] J. D. Dixon, The structure of linear groups, Van Nostrand, New York, 1971.
- [7] M. R. Dixon, M. J. Evans, L. A. Kurdachenko, Linear groups with the minimal condition on subgroups of infinite central dimension, J. Algebra 277, 172-186, 2004.
- [8] M. R. Dixon, M. J. Evans, L. A. Kurdachenko, Linear groups with the minimal condition on some infinite dimensional subgroups, Ukrainian Math. J. 57, 1726-1740, 2005.
- [9] M. R. Dixon, L. A. Kurdachenko, Linear groups with infinite central dimension, in "Groups St Andrews 2005" Vol. 1 (C. M. Campbell et al., eds.), London Math. Soc. Lecture Note Ser. 399. Cambridge University Press, Cambridge, 2007, pp.306-312.
- [10] M. R. Dixon, L. A. Kurdachenko, J. M. Muñoz-Escalano, J. Otal, Trends in infinite dimensional linear groups, in "Groups St Andrews 2009", to appear.

- [11] M. R. Dixon, L. A. Kurdachenko, J. Otal, Linear groups with bounded action, Algebra Coll., to appear.
- [12] M. R. Dixon, L. A. Kurdachenko, J. Otal, Linear groups with finite dimensional orbits, pre-print.
- [13] L. Fuchs, Infinite abelian groups, Vol. 1. Academic Press, New York, 1970.
- [14] P. Hall, Nilpotent groups, Queen Mary College Notes, London, 1969.
- [15] J.I. Hall, Finitary linear transformations groups and elements of finite local degree, Arch. Math. 50, 313–318, 1988.
- [16] J.I. Hall, Locally finite simple groups of finitary linear transformations, In "Finite and locally finite groups, Istambul 1994", NATO ASI Series Vol. 471, Kluver, Dordrecht 1995, pp. 147–188.
- [17] J. I. Hall, Periodic simple groups of finitary linear transformations, Ann. of Math. 163, 445-498, 2006.
- [18] L. S. Kazarin, L. A. Kurdachenko, Conditions for finiteness and factorization in infinite groups, Russian Math. Surveys 47, 81-126, 1992.
- [19] O. H. Kegel, B. A. F. Wehrfritz, Locally finite groups, North-Holland, Amsterdam, 1973.
- [20] V. V. Kirichenko, L. A. Kurdachenko, N. V. Polyakov, On certain finitary modules, in "Third International Algebraic Conference in Ukraine", Nat. Akad. Nauk Ukr., Inst. Mat. Kiev, pp.283-296, 2002.
- [21] L. A. Kurdachenko, *Groups that satisfy weak minimality and maximality conditions for normal subgroups*, Siberian Math. J. **20**, 1979, pp.755-761.
- [22] L. A. Kurdachenko, *Groups satisfying the weak minimum and maximum conditions for subnormal subgroups*, Math. Notes. **29**, 1981, pp.11-61.
- [23] L. A. Kurdachenko, *Locally nilpotent groups with the weak minimal condition for normal subgroups*, Siberian Math. J. **25**, 1984, pp.589-594.
- [24] L. A. Kurdachenko, Locally nilpotent groups with weak minimality and maximality conditions for normal subgroups, Dokl. Akad. Nauk Ukrain. SSR Ser. A 8, 9-12, 1985.
- [25] L. A. Kurdachenko, V. E. Goretskii, Groups with weak minimality and maximality conditions for non-normal subgroups, Ukrainian Math. J. 41, 1474-1477, 1989.
- [26] L. A. Kurdachenko, J. M. Muñoz-Escalano, J. Otal, Antifinitary linear groups, Forum Mat. 20, 27-44, 2008.

- [27] L. A. Kurdachenko, J. M. Muñoz-Escalano, J. Otal, Locally nilpotent linear groups with the weak chain conditions on subgroups of infinite central dimension, *Pub. Mat.* 52, 151-169, 2008.
- [28] L. A. Kurdachenko, J. M. Muñoz-Escalano, J. Otal, Soluble linear groups with some restrictions on their subgroups of infinite central dimension, in "Proc. Ischia Group Theory 2008", eds. M. Bianchi et al., ISBN 13 978-981-4277-79-2, World Sc. Publ., Singapore 2009 pp. 156-173.
- [29] L. A. Kurdachenko, J. M. Muñoz-Escalano, J. Otal, N. N. Semko, Locally nilpotent linear groups with restrictions on their subgroups of infinite central dimension, *Geom. Ded.* 138, 69-81, 2009.
- [30] L. A. Kurdachenko, J. OtaL, I. Ya. Subbotin, Artinian modules over group rings, Birkhäuser, Basel, 2007.
- [31] L. A. Kurdachenko, H. Smith, Groups with the weak minimal condition for non-subnormal subgroups, *Ann. Mat. Pura Appl.* 173, 299-312, 1997.
- [32] L. A. Kurdachenko, H. Smith, Groups with the weak maximal condition for non-subnormal subgroups, *Ricerche Mat.* 47, 29-49, 1998.
- [33] L. A. Kurdachenko, H. Smith, Locally soluble-by-finite groups with small deviation for non-subnormal subgroups, *Comment. Math. Univ. Caroline* 48, 1-7, 2007.
- [34] L. A. Kurdachenko, H. Smith, Groups with small deviation for non-subnormal subgroups, *Cent. Eur. J. Math.* 7, 186-199, 2009.
- [35] L. A. Kurdachenko, I. Ya. Subbotin, Linear groups with the maximal condition on subgroups of infinite central dimension, *Pub. Mat.* 50, 103-131, 2006.
- [36] J. C. Lennox, D. J. S. Robinson, The Theory of Infinite Soluble Groups, Oxford University Press, Oxford, 2004.
- [37] A. I. Maltsev, On faithful representations of infinite groups of matrices, *Mat. Sb.* 8, 405-422, 1940 = Amer. Math. Transl. (2) 45, 1-18, 1965.
- [38] A. I. Maltsev, On certain classes of infinite soluble groups, *Mat. Sb.* 28, 567-588, 1951 = Amer. Math. Soc. Transl. (2) 2, 1-21, 1956.
- [39] J. C. McConnell, J. C. Robson, Noncommutative noetherian rings, Revised edition. Graduate Studies in Mathematics, 30. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2001.
- [40] U. Meirfrankenfeld, R.E. Phillips, O. Puglisi, Locally solvable finitary linear groups, *J. London Math. Soc.* 47, 31–40, 1993.

- [41] J. M. Muñoz-Escalano, Grupos lineales con restricciones sobre sus subgrupos de dimensión central infinita, Ph. dissertation, Universidad de Zaragoza, 2007.
- [42] J. M. Muñoz-Escalano, J. Otal and N. N. Semko, Periodic linear groups with the weak chain conditions on subgroups of infinite central dimension, Comm. Algebra 36, 749-763, 2008.
- [43] A. Yu. Ol'shanskii, An infinite group with subgroups of prime orders, Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Mat. 44, 309-321, 1980.
- [44] R.E. Phillips, The structure of groups of finitary transformations, J. Algebra 119, 400–448, 1988.
- [45] R. E. Phillips, Finitary linear groups: a survey, in "Finite and Locally Finite Groups, Istanbul 1994", (B. Hartley et al., eds.), NATO Adv. Sci. Inst. Ser. C Math. Phys. Sci. 471. Kluwer Acad. Publ., Dordrecht 1995, pp.111-146.
- [46] V. P. Platonov, The theory of algebraic linear groups and periodic groups, Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser Mat. 30, 573-620, 1996 = Amer. Math. Transl. (2) 69, 61-110, 1968.
- [47] B. I. Plotkin, Radical groups, Mat. Sb. 37, 507-526, 1955 = Amer. Math. Translations (2) 17, 9-28, 1961.
- [48] D. J. S. Robinson, Finiteness conditions and generalized soluble groups, Parts 1, 2, Springer, Berlin, 1972.
- [49] I. Schur, Über Gruppen periodischer Substitutionen, Sitzungs. Preuss. Akad. Wiss. 1911, 619-627.
- [50] D. A. Suprunenko, Soluble and nilpotent linear groups, Transl. of Math. monographs 9, Amer. Math. Soc., 1963.
- [51] B. A. F. Wehrfritz, Infinite Linear Groups, Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete 76, Springer-Verlag, New York, Heidelberg, Berlin, 1973.
- [52] B. A. F. Wehrfritz, Nilpotent cofinitary groups, J. Algebra 177, 569-588, 1995.
- [53] B. A. F. Wehrfritz, Supersoluble and related cofinitary groups, Math. Nachr. 176, 301-314, 1995.
- [54] B. A. F. Wehrfritz, Locally soluble cofinitary groups with few fixed points, Forum Math. 9, 603-612, 1997.
- [55] D. I. Zaitsev, The groups satisfying the weak minimal condition, Ukrain. Math. J. 20, 472-482, 1968.
- [56] H. Zassenhaus, Beweis eines Satzes über diskrete Gruppen, Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg 12, 289-312, 1938.



## El efecto túnel en magnetismo

Fernando Luis

Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, CSIC — Universidad de Zaragoza, and  
Dpto. de Física de la Materia Condensada, Universidad de Zaragoza  
50009-Zaragoza, SPAIN

*Premio a la Investigación de la Academia 2010. Sección de Físicas*

### Resumen

El efecto túnel, por el que una partícula material escapa de un pozo de potencial atravesando regiones clásicamente prohibidas, es una de las predicciones de la física cuántica más sorprendentes y contrarias a nuestra intuición. En este artículo, se resume la investigación, llevada a cabo durante los últimos 20 años, del efecto túnel de espín en nanomateriales magnéticos. Se hace especial énfasis en describir experimentos realizados sobre clusters moleculares, como  $Mn_4$ ,  $Fe_8$  y  $Mn_{12}$  que proporcionan la posibilidad de estudiar el magnetismo en la escala intermedia entre átomos y nanopartículas. Debido a su alto espín y elevada anisotropía, estas “moléculas-imán” presentan histéresis magnética a temperaturas próximas a la del Helio líquido. Los ciclos de histéresis no son, sin embargo, nada convencionales: muestran “saltos” seguidos por “plateaus” que son indicativos de la naturaleza discreta, típica de la física cuántica, de su espectro de niveles de energía. Los saltos están asociados al fenómeno de efecto túnel resonante, que tiene lugar cada vez que el campo magnético induce un cruce entre dos niveles de energía correspondientes a orientaciones opuestas del espín. El efecto túnel tiene lugar entre estados excitados, poblados térmicamente, para los que dicho efecto no está bloqueado por la acción de campos dipolares e hiperfinos. A muy bajas temperaturas, el efecto túnel ocurre directamente entre los dos estados  $| \uparrow \rangle$  y  $| \downarrow \rangle$  de mínima energía. Este fenómeno, no previsto anteriormente, está inducido por la fluctuación del campo hiperfino, que lleva momentáneamente a algunas moléculas a condiciones de resonancia. Experimentos recientes muestran que este proceso es también capaz de mediar el intercambio de energía entre los espines y la red cristalina, permitiendo a aquéllos alcanzar su estado de equilibrio térmico. El efecto túnel resonante es un proceso

incoherente debido a las perturbaciones ejercidas por fonones, en el caso de estados excitados, y espines nucleares, en el caso de efecto túnel por el estado fundamental. Un campo magnético perpendicular al eje de anisotropía induce fluctuaciones cuánticas del espín y permite, por ello, conseguir que superposiciones cuánticas, o estados “gato de Schrödinger”, de los estados clásicos  $|\uparrow\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\downarrow\rangle$  sean robustas frente a la decoherencia. En estas condiciones, es posible también medir directamente el desdoblamiento por efecto túnel  $\Delta_S$  mediante experimentos de calor específico. La aplicación de estos fenómenos a tecnologías como la grabación magnética de alta densidad, la refrigeración magnética y, sobre todo, la información cuántica, requiere procesar los nanomateriales moleculares, por ejemplo depositándolos sobre una sustrato sólido. Experimentos recientes muestran que el espín y la anisotropía de la molécula, así como los fenómenos de memoria magnética y de efecto túnel, se pueden mantener casi intactos en diferentes formas materiales, tan diversas como nanopartículas, amorfos, cristales líquidos, etc. Estos clusters moleculares brindan, por sus características, candidatos sólidos para la realización de los elementos básicos de un ordenador cuántico universal, es decir, qubits y puertas lógicas cuánticas.

## Abstract

Quantum tunnelling of a particle escaping from a potential well through classically forbidden regions is one of the most surprising, as well as contrary to our daily perceptions, predictions of quantum physics. Here, we review the research, carried out during the past 20 years, of spin tunnelling in magnetic nanomaterials. Especial emphasis is made in describing experiments performed on molecular clusters, such as  $Mn_4$ ,  $Fe_8$  and  $Mn_{12}$ , which provide the possibility of studying magnetism in the intermediate scale between paramagnetic atoms and nanoparticles. Because of its high spin and strong anisotropy, these “single-molecule magnets” show magnetic hysteresis near liquid Helium temperatures. The hysteresis is not very conventional, though: it shows “jumps” followed by “plateaus”, which are indicative of the discrete nature, typical of quantum physics, of the energy level spectrum. The magnetization jumps are associated with the phenomenon of resonant spin quantum tunnelling, which takes place every time the magnetic field induces a crossing between two energy levels corresponding to opposite spin orientations. Quantum tunnelling takes place between thermally populated excited states for which the above-mentioned effect is not blocked by the action of dipolar and hyperfine magnetic fields. In the limit of very low temperatures, pure quantum tunnelling occurs directly between the two states  $|\uparrow\uparrow\rangle$  and  $|\downarrow\downarrow\rangle$  of minimum energy. This previously unexpected phenomenon is induced by the fluctuation of the hyperfine field, which occasionally brings some spins to resonant conditions. Recent experiments show that this process is also able to mediate the energy exchange between the spins and the crystal lattice, enabling the latter to reach thermal equilibrium conditions. Resonant spin tunnelling is an

incoherent process, as a result of the perturbations exerted by phonons, in the case of excited states, and nuclear spins, in the case of tunnelling via the ground state. By applying a magnetic field perpendicular to the anisotropy axis, which induces quantum spin fluctuations, it is possible to make quantum superpositions, or magnetic “Schödinger cat” states, robust against decoherence. Under such conditions, it is possible to directly detect the quantum tunnel splitting  $\Delta_S$ , associated with zero-point fluctuations, by means of specific heat measurements. The application of these phenomena to technologies such as high density magnetic recording, magnetic refrigeration and quantum information processing requires that these molecular nanomagnets be processed, for example depositing them on solid substrate. Recent experiments show that the molecular spin and anisotropy, as well as the phenomena of hysteresis and quantum tunnelling, can remain virtually intact in such diverse material forms as nanoparticles, amorphous, liquid crystals, etc. Because of their unique properties, these molecular clusters offer solid candidates for the realization of the basic elements of a quantum computer, that is, the qubits and the quantum logical gates.

## 1. Introducción y motivación

La física cuántica constituye uno de los pilares de la ciencia moderna. La teoría sienta las bases de nuestra comprensión de los constituyentes últimos de la materia, es decir, de qué estamos hechos nosotros y el mundo que nos rodea. Ha sido, también, extremadamente útil. Tecnologías actuales como la electrónica e informática basadas en semiconductores, el láser, la superconductividad, las técnicas de resonancia magnética nuclear y electrónica, por citar solo algunas, han sido posibles gracias a la comprensión y aplicación de fenómenos cuánticos. A pesar de ello, o quizás por este motivo, la interpretación de sus predicciones ha suscitado un intenso debate desde su misma concepción, a principios del siglo XX. No es de extrañar, por ello, que el estudio de los fenómenos cuánticos, sus aplicaciones y paradojas constituya actualmente uno de los campos más activos de investigación en física. El presente artículo describe, desde una perspectiva bastante personal, una de estas líneas de investigación.

A pesar de no formar parte de los postulados originales, el principio de incertidumbre de Heisenberg [1] resume la esencia de la teoría cuántica y su radical ruptura con algunos de los conceptos de la física Newtoniana, o clásica. El principio pone límites, por vez primera en la historia de la ciencia, al conocimiento de la Naturaleza. En concreto, establece que las precisiones  $\Delta q$  y  $\Delta p$  con la que se pueden medir simultáneamente la posición  $q$  y el momento  $p$  de una partícula material están relacionadas por la expresión

$$\Delta q \Delta p \gtrsim \hbar \quad (1)$$

donde  $\hbar = h/2\pi$  y  $h$  es la constante de Planck. La Ec. (1) supone el fin del concepto clásico de trayectoria [2] y justifica la necesidad de describir los fenómenos naturales, sobre todo a escalas atómica y sub-atómica, mediante funciones de onda y probabilidades asociadas a ellas [3]. El principio de incertidumbre se aplica también a cualquier par de magnitudes físicas cuyos operadores asociados no commuten entre sí, entre ellas el espín o el momento magnético [4], lo que resulta crucial en el ámbito del trabajo descrito en este artículo.

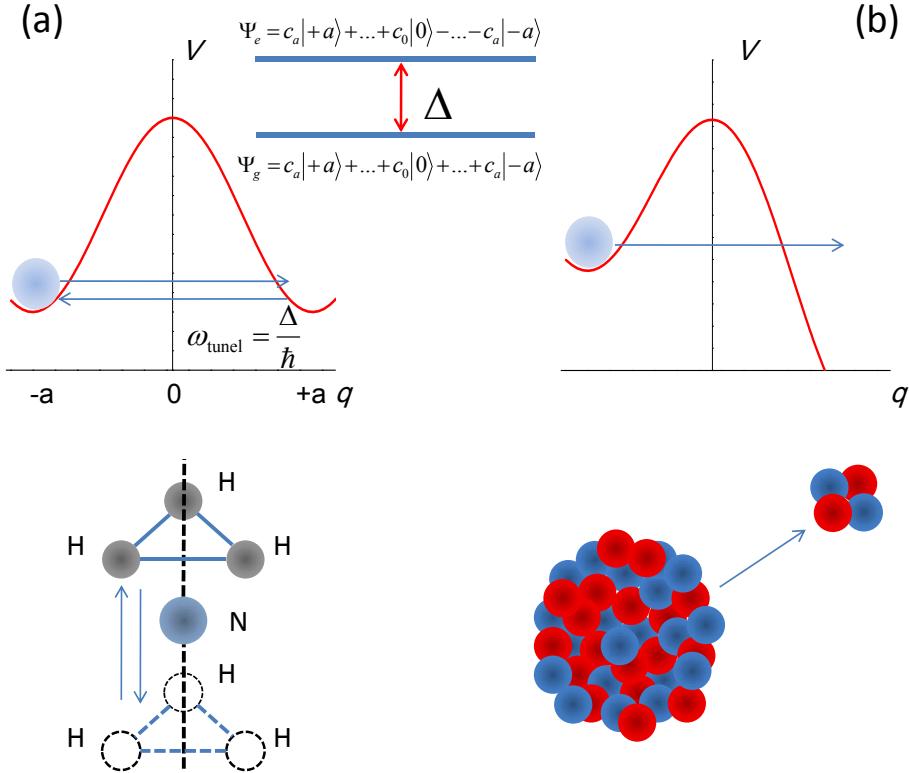


Figura 1.— (a) Potencial clásico de “doble pozo” donde una barrera de potencial separa dos posiciones de mínima energía  $q = \pm a$ . A la derecha, arriba, se muestra la situación según la física cuántica. La no commutación de posición y momento (o energía cinética  $p^2/2m$ ) conduce a funciones de onda que son superposiciones simétricas o antisimétricas de estados posición. Asimismo, la degeneración clásica se rompe por una cantidad  $\Delta$  (desdoblamiento por efecto túnel). Si la partícula se sitúa inicialmente a un lado de la barrera, oscila por efecto túnel *coherente* a una frecuencia  $\omega_{\text{tunel}} = \Delta/\hbar$ . El ejemplo característico, en el mundo microscópico, de este fenómeno lo constituye la molécula de  $\text{NH}_3$ . (b) Si el potencial no es simétrico, el efecto túnel *incoherente* permite que una partícula material “escape” de un pozo de potencial metaestable. Este fenómeno explica el decaimiento radiactivo de núcleos pesados por emisión de partículas  $\alpha$ .

La incertidumbre cuántica y, por tanto, la necesidad de describir los autoestados del Hamiltoniano como superposiciones de estados “clásicos” (por ejemplo, estados con posición bien definida en el caso de un electrón) conducen a fenómenos completamente alejados de la intuición clásica. Uno de ellos, el efecto túnel, se ilustra de manera esquemática en la Fig. 1. Una partícula de masa finita  $m$  está sometida a un potencial de “doble pozo”  $V(q)$ ,

que es una función simétrica de la posición. La no conmutación entre  $q$  y  $p$  tiene consecuencias dramáticas sobre los autoestados y los autovalores del Hamiltoniano. En lugar de las posiciones clásicas,  $q = \pm a$ , dichos estados son funciones simétricas o antisimétricas de  $q$ . La degeneración clásica se rompe en una cantidad  $\Delta$ , conocida como el desdoblamiento por efecto túnel. El nombre alude al hecho de que un estado clásico, por ejemplo el  $q = -a$  correspondiente a “colocar” la partícula a la izquierda de la barrera de potencial, evoluciona con el tiempo. De hecho, la partícula oscila de manera periódica, o coherente, entre ambos lados de la barrera, a una frecuencia  $\omega_{\text{tunel}} = \Delta/\hbar$ .

El efecto túnel explica numerosos fenómenos observados experimentalmente, incluyendo, entre otros, la emisión de micro-ondas (MASER) por moléculas de amoniaco  $\text{NH}_3$  [5, 6], la estabilidad de puentes de hidrógeno [7], el movimiento de defectos y las rotaciones moleculares observados en algunos sólidos [8, 9], la desintegración alfa de núcleos pesados [10] y el efecto Josephson en superconductores [11]. Es, a su vez, el fundamento de avances tecnológicos como los sensores SQUID (Superconducting Quantum Interference Devices) [12] o el microscopio de barrido por efecto túnel [13]. Sin embargo, en estos ejemplos el efecto túnel se circunscribe al movimiento de objetos microscópicos, en concreto tomos, electrones, partículas  $\alpha$  o pares de Cooper. El desdoblamiento  $\Delta$  y, por tanto, también  $\omega_{\text{tunel}}$  decrecen al aumentar la masa de la partícula, anulándose en el límite en que  $m \rightarrow \infty$ . Esta condición resulta tranquilizadora porque justifica un sencillo hecho experimental: que jamás hemos observado con nuestros sentidos el efecto túnel de un objeto macroscópico (una pelota de tenis, por ejemplo). Pero, es realmente imposible o sólo muy difícil de observar? Al fin y al cabo, una pelota de tenis está formada por átomos sobre los que rigen las leyes cuánticas.

La “interpretación de Copenhague” de la física cuántica, establecida por Niels Bohr y sus colaboradores [14], traza una línea divisoria entre la descripción de los sistemas cuánticos, típicamente objetos de tamaño microscópico sujetos a un proceso de medida experimental, y los propios instrumentos de medida. Para que los resultados experimentales tengan un significado para nosotros, los instrumentos han de obedecer las leyes de la física clásica. La propia teoría permite, de acuerdo al llamado “principio de correspondencia”, definir estados clásicos de objetos macroscópicos, para los que la incertidumbre cuántica [Eq. (1)] resulta imperceptible. Los promedios de los observadores  $Q$  y  $P$ , que representan la posición y el momento del centro de masas, respectivamente, obedecen las leyes de Newton [1]. Sin embargo, este principio no prohíbe la existencia de superposiciones cuánticas de dichos objetos macroscópicos. Como mostró Schrödinger [2] con su célebre paradoja “del gato”, es posible concebir situaciones (experimentos “pensados”) en las que la incertidumbre “escapa” del mundo microscópico hacia el macroscópico. En el caso del gato, se establece una correspondencia biunívoca (una caja cerrada dotada de un diabólico dispositivo) entre los estados del objeto cuántico (dos estados de energía de

un núcleo radiactivo) y los del gato (vivo y muerto). La aplicación de las leyes cuánticas conduce, de manera inevitable, a una situación en que el gato se encuentra en la superposición “vivo + muerto”. Tan sólo la medida experimental, es decir, la apertura de la caja por un observador, permite resolver el dilema: el colapso de la función de ondas conduce, necesariamente, a una de las dos opciones. Schrödinger utilizaba la paradoja para plantear dudas sobre la completitud de la descripción cuántica de la Naturaleza, y sobre el significado de las superposiciones. Hoy sabemos que dichas superposiciones existen (o, al menos, conocemos numerosas manifestaciones experimentales derivadas de su existencia). La interpretación de Copenhague no resuelve, sin embargo, la cuestión de cuándo y cómo se produce el colapso y, por ello, no explica si la incómoda superposición “gato vivo + gato muerto” llega realmente a existir.

Situaciones semejantes se producen, en principio, cuando un aparato de medida se pone en contacto con un objeto cuántico. Por este motivo, a esta cuestión se le conoce a menudo como el “problema de la medida.”<sup>en</sup> física cuántica [15, 16]. Este dilema ha conocido diversas soluciones, desde la asignación del colapso a observadores conscientes de serlo [17] a la simple negación del colapso [18, 19]. La explicación más aceptada, dentro de “ortodoxia cuántica, es la basada en el efecto del entorno, o “decoherencia” [20, 21]. En pocas palabras, las superposiciones de estados macroscópicamente distinguibles (la posición de una pelota de tenis con respecto a la red o la salud de un gato) son, según esta teoría, extremadamente sensibles a la interacción del objeto con un enorme número de grados de libertad microscópicos, tales como vibraciones de sus propios átomos o de los que le rodean, fotones de luz, moléculas del aire, etc. Superposiciones de objetos macroscópicos son, por ello, perfectamente posibles aunque extremadamente difíciles de observar. Tan difícil que, hasta casi la década de 1990, no existía ninguna evidencia experimental de su existencia <sup>1</sup>.

La búsqueda experimental de “gatos de Schrödinger.” estimuló el estudio de materiales magnéticos y superconductores de tamaño mesoscópico, es decir, más complejos que un átomo pero, a su vez, suficientemente pequeños para que los fenómenos cuánticos resulten observables (recuérdese que  $\Delta$  decrece al aumentar  $m$ ). Ambas propiedades, el magnetismo y la superconductividad, están intimamente ligados a la estructura cuántica de la materia. Así, el ferromagnetismo está estrictamente prohibido en física clásica, según el teorema de Bohr-van Leeuwen [23, 24], mientras que la superconductividad está asociada a la condensación de Bose de pares electrónicos de Cooper. Además, se encuentran situaciones en que las variables que rigen su estado macroscópico pueden describirse con un potencial

---

<sup>1</sup>La situación experimental en esos años queda reflejada en la siguiente frase de A. Caldeira y A. Leggett (1983) “...Yet it is a curious fact that if one asks what is the experimental evidence that quantum mechanics does apply on the scale of macroscopic bodies [...] then at least until very recently the answer was that there was none...”[22].

clásico análogo al de la Fig. 1. Por ejemplo, en el caso de SQUIDs, formados por anillos de material superconductor interrumpido por una o dos uniones Josephson, diferentes estados de flujo magnético están separados por barreras de energía potencial [12, 25, 26]. Por otra parte, el uso de nanopartículas magnéticas como soportes de información [27, 28] se basa en que sus momentos magnéticos tienen orientaciones bien determinadas y suficientemente estables en el tiempo [29, 30]. La estabilidad, o memoria, magnética está asociada a la anisotropía que da también lugar, en casos sencillos, a un potencial de doble pozo en función de la orientación del espín neto. Estos sistemas ofrecen, por tanto, la posibilidad de investigar experimentalmente si fenómenos como el efecto túnel, que están intimamente ligados a la incertidumbre cuántica, sobreviven más allá de la escala atómica en las condiciones apropiadas (ver Fig. 2).

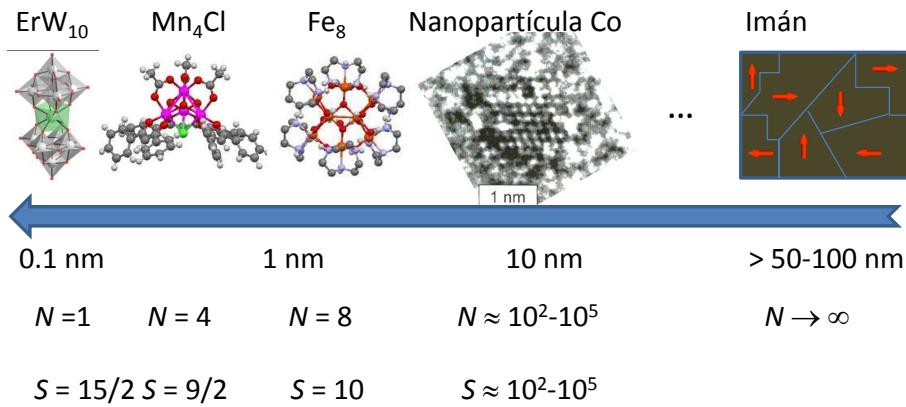


Figura 2.— Materiales magnéticos con diferentes escalas de tamaño. Por debajo de un tamaño crítico, la estructura de dominios magnéticos, característica de imanes macroscópicos, da paso a una configuración monodominio. En la figura, se muestran algunos de los nanomateriales magnéticos que son objeto del presente trabajo y que constituyen un puente entre la escala atómica y el mundo macroscópico. Como rasgo común a todos ellos, la energía de anisotropía da lugar a un potencial clásico de doble pozo, lo que brinda la posibilidad de investigar el fenómeno de efecto túnel del espín a escala mesoscópica.

El presente artículo presenta un resumen, necesariamente incompleto pero espero que coherente, del desarrollo experimentado en la investigación del efecto túnel en nanomateriales magnéticos, desde los conceptos básicos hasta las posibles aplicaciones al campo de la información cuántica. Las diferentes secciones recogen mayoritariamente trabajo original llevado a cabo en el Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, en Zaragoza, a menudo en colaboración con diversos grupos de investigación, aunque, por completitud, se incluyen también algunos resultados tomados de diversas fuentes. La sección 2 contiene información básica acerca de los modelos que describen la respuesta de un nanoimán, así como una introducción al concepto de efecto túnel de espín y al fenómeno de la deco-

herencia en materiales magnéticos. La sección 3 describe el descubrimiento experimental del efecto túnel de espín en las denominadas moléculas-imán, que constituyó la primera prueba irrefutable de la existencia de dicho fenómeno. La descripción teórica de este efecto túnel resonante por estados excitados se detalla en la sección 4. La sección 18 se dedica a experimentos realizados en la región próxima al cero absoluto, donde es posible observar el efecto túnel directo entre los estados de mínima energía, y cuya interpretación teórica dista de ser completa. La síntesis de cristales de clusters moleculares abrió la vía al estudio experimental de estados superposición ("gatos de Schrödinger") magnéticos (sección 6). La sección 7 discute posibles aplicaciones de estos fenómenos, sobre todo en el campo de la información cuántica. Finalmente, en la 8 se exponen las conclusiones de este trabajo.

## 2. Efecto túnel de espín: conceptos básicos

El magnetismo es un fenómeno intrínsecamente cuántico. El momento magnético de un átomo está determinado, de acuerdo a las reglas de Hund, por la estructura de orbitales electrónicos, el principio de exclusión de Pauli y la existencia de un grado de libertad, el espín, sin análogo clásico. De hecho, el teorema de Bohr-van Leeuwen [23, 24] demuestra que la imanación  $M$  de un material se anula en física clásica. Resulta, por eso, curioso que el concepto de efecto túnel de la imanación no fuese tenido en cuenta, ni siquiera desde un punto de vista teórico, hasta la década de 1980. Un posible motivo es que la respuesta de la imanación a un estímulo externo, por ejemplo el ciclo de histéresis de un imán como respuesta a un campo magnético, se puede describir mediante modelos clásicos. En esta sección, se revisan conceptos básicos sobre la energía y la dinámica de espín de monodominios magnéticos, y se definen las condiciones experimentales que pueden hacer posible la observación de fenómenos cuánticos, como el efecto túnel de espín.

### 2.1. Energía de un monodominio magnético. Concepto de memoria magnética.

Un imán forma, de manera natural, dominios magnéticos, es decir regiones de imanación uniforme separadas por paredes de dominio [31]. La orientación de la imanación cambia de un dominio a otro, como muestra la Fig. 2, de manera que la resultante tiende a anularse, minimizando así la energía magnetostática. En un material masivo, esta disminución de energía compensa, con creces, el aumento de energía asociado a la formación de paredes de dominio. El balance de energías cambia, sin embargo, al reducir el tamaño del material. Por debajo de un tamaño crítico, la configuración magnética uniforme, es decir monodominio, tiene la mínima energía [31, 32, 33].

En ausencia de campo magnético, la energía de un monodominio está determinada por la anisotropía, que depende de la orientación relativa entre el momento magnético neto  $\mu$  y el eje, o ejes, de anisotropía  $\mathbf{z}$ . El origen de dicha anisotropía es muy diverso, uniéndose

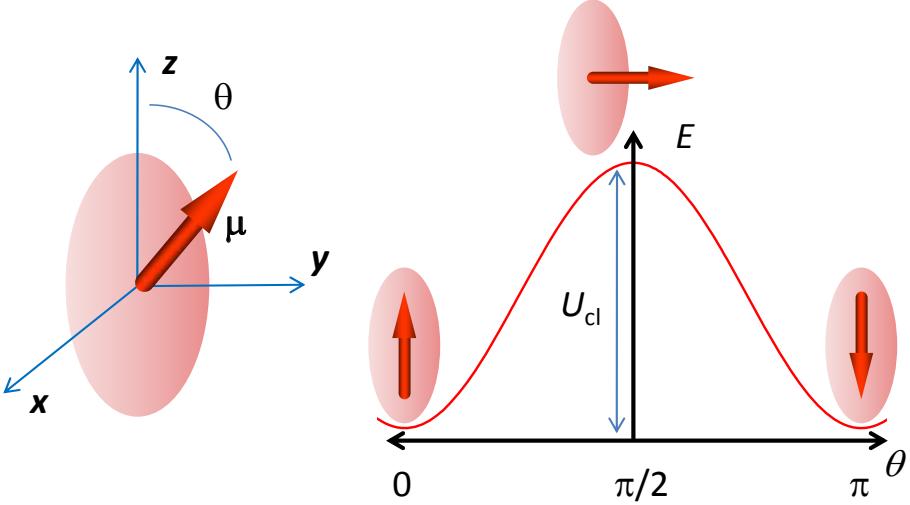


Figura 3.— Energía clásica de un monodominio magnético en función de la orientación de su momento magnético  $\mu$  con respecto al eje de anisotropía  $\mathbf{z}$ . El ángulo  $\theta$  está definido en el esquema a la izquierda de la figura. La energía se representa para el caso de anisotropía puramente uniaxial, y en ausencia de campo magnético [Ec. (2)].

a la causada por el campo cristalino (o anisotropía magnetocrystalina), las debidas a la energía magnetostática (o anisotropía de forma) y a la ruptura de simetría en los sitios cercanos a la superficie de la partícula (anisotropía de superficie) [34].

En el caso más sencillo, de anisotropía magnética uniaxial, e incluyendo el término de Zeeman de interacción con un campo magnético externo  $\mathbf{H}$ , la energía clásica de un monodominio magnético adopta la forma siguiente [34, 35]

$$E = -KV \cos^2 \theta - \mu \mathbf{H} \quad (2)$$

donde  $K$  es la constante de anisotropía,  $V$  el volumen de la nanopartícula y  $\theta$  es el ángulo que forma  $\mu$  con el eje de anisotropía. A campo nulo, la Ec. 2 da lugar a un potencial de doble pozo simétrico, como se muestra en la Fig. 3, con una barrera de altura  $U_{\text{cl}} = KV$  que separa las orientaciones de mínima energía  $\theta = 0$  y  $\theta = \pi$ . Comparando las Figs. 1 y 3, puede verse que un monodominio magnético proporciona un modelo análogo al de una partícula material, donde la variable  $q$  corresponde a la proyección  $\mu_z$  del momento magnético sobre el eje de anisotropía.

Un campo magnético  $H_z > 0$  rompe dicha simetría y convierte a la orientación  $\theta = \pi$  en metaestable. En este caso, la barrera de energía que separa al estado metaestable del estable se ve reducida a

$$U_{\text{cl}} = KV(1 - H/H_K)^2, \quad (3)$$

donde  $H_K = 2KV/\mu$  es el campo de anisotropía.

A pesar de su sencillez, este modelo clásico describe un buen número de situaciones

físicas, con importantes implicaciones tecnológicas. Una propiedad característica de un imán es el fenómeno de histéresis o memoria magnética. En imanes macroscópicos, la histéresis se debe al anclaje de paredes de dominio por defectos de la red cristalina [31].

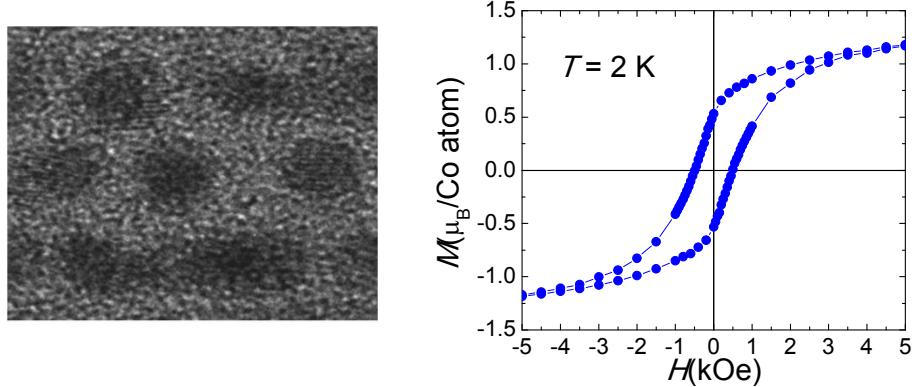


Figura 4.— Curva de histéresis magnética de nanopartículas de Co de 1,8 nm de diámetro (imagen a la izquierda) depositadas sobre una matriz de alumina [37, 38].

A pesar de no contener dominios, nanopartículas magnéticas muestran también histéresis [36], como ilustra el ejemplo de la Fig. 4. La explicación de este efecto se debe originalmente a L. Néel [29], quien se preguntaba por qué la polarización magnética de diferentes estratos guarda información acerca de la orientación del campo magnético terrestre en las correspondientes eras geológicas, y fue desarrollada más tarde por Brown [30]. El modelo se basa en el “salto” de la barrera de energía de anisotropía mediante activación térmica [39]. La probabilidad de salto depende de la población térmica, a la temperatura  $T$  dada, del máximo de la barrera de potencial definida en la Fig. 3. El tiempo característico de inversión del momento magnético  $\tau$  sigue entonces la conocida ley de Arrhenius

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{U}{k_B T}\right) \quad (4)$$

con una energía de activación  $U = U_{\text{cl}}$  y un prefactor  $\tau_0$  que es del orden del tiempo de vida del máximo.

La duración de la polarización magnética conseguida tras aplicar un campo magnético y después reducirlo de nuevo a cero, es decir, la información almacenada en un bit magnético, depende exponencialmente de su volumen. Por este motivo, los bits pierden la capacidad de almacenar información a temperatura ambiente por debajo de un cierto tamaño. Vencer este límite “superparamagnético” constituye uno de los retos a los que se enfrenta el progreso en la capacidad de almacenamiento de información [28] y justifica el interés de investigar los mecanismos que determinan la anisotropía magnética [37, 38, 40, 41, 42, 43].

## 2.2. Hamiltoniano cuántico de un espín con anisotropía. Cálculo de $\Delta$ .

El modelo de la Ec. (2) no es exclusivo de nanopartículas magnéticas, sino que describe el potencial clásico de cualquier spín  $\mathbf{S}$  con anisotropía uniaxial. Este mismo modelo admite una formulación cuántica, con el Hamiltoniano siguiente

$$\mathcal{H}_0 = -DS_z^2 - g\mu_B \mathbf{SH} \quad (5)$$

donde  $D$  es un parámetro de anisotropía uniaxial y  $g$  es la razón giromagnética. Los parámetros de las respectivas formulaciones, clásica y cuántica, se relacionan entre sí mediante las expresiones  $U_{\text{cl}} = DS^2$  y  $\mu = g\mu_B S$ . Uno de los aspectos más importantes que introduce la descripción cuántica es el carácter discreto del espectro de niveles de energía. En el caso de un espín, este carácter viene impuesto además por la cuantización del momento angular. La proyección  $S_z/\hbar$  del espín sobre el eje de anisotropía admite autovalores  $m = +S, +(S-1), \dots, -(S-1), -S$ , como se muestra en la Fig. 5. El doblete fundamental  $m = \pm S$  está separado del primer doblete excitado  $m = \pm(S-1)$  por una energía finita  $\Omega_0 = (2S-1)D$ . Esta cantidad caracteriza el grado de “discretitud” del espectro de niveles [44].

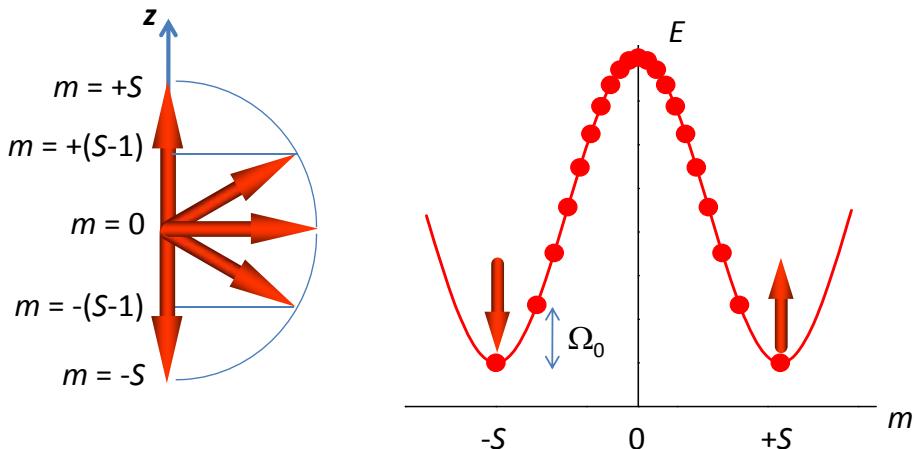


Figura 5.— Descripción cuántica del espín  $S$  ( $\mu = g\mu_B S$ ), de acuerdo al Hamiltoniano (5). A diferencia del caso clásico, aparece un espectro discreto de niveles de energía (●), asociados a los autoestados de  $S_z$ . En el caso uniaxial. El máximo desdoblamiento entre dobletes contiguos es  $\Omega_0 = (2S-1)D$ , donde  $D$  es un parámetro de anisotropía.

Las proyecciones  $\pm S$  son análogas, en el caso de un espín, a los estados de posición  $\pm a$  de una partícula sometida a un potencial de doble pozo, como el de la Fig. 1. Es, por tanto natural preguntarse si existe la posibilidad de que el espín invierta su polarización, de  $+S$  a  $-S$ , por efecto túnel a campo nulo ( $H = 0$ ). Resulta fácil darse cuenta de que la respuesta es negativa, ya que el Hamiltoniano (5) commuta con el operador  $S_z$  que, recordemos, juega el papel de la “posición”. Los autoestados de  $S_z$  son, por ello, estacionarios y los dobletes  $|\pm m\rangle$  están exactamente degenerados. Esto significa que el

desdoblamiento por efecto túnel  $\Delta_m$  y, por tanto, la frecuencia de túnel asociada a él, se anulan. El Hamiltoniano  $\mathcal{H}_0$  describe pues una situación análoga a la de una partícula material de masa infinita.

Para que exista efecto túnel, es preciso introducir términos adicionales, de “energía cinética”, que no comuten con  $S_z$ . Debido a las reglas de commutación del espín, estos términos deben incluir componentes  $S_x$  ó  $S_y$ . Su origen reside en la existencia de distorsiones con respecto a la anisotropía puramente uniaxial. Estos términos están determinados por la simetría puntual que rodea a cada átomo magnético. Por ejemplo, un espín con una distorsión ortorrómbica está descrito por el Hamiltoniano siguiente

$$\mathcal{H} = -DS_z^2 - E(S_x^2 - S_y^2) - g\mu_B \mathbf{SH} \quad (6)$$

donde  $E$  es un nuevo parámetro de anisotropía “no diagonal”.

En principio, el cálculo de  $\Delta_m$  y de las nuevas funciones de onda del Hamiltoniano  $|\psi_l\rangle = \sum_m \psi_{l,m}|m\rangle$  se reduce a diagonalizar el Hamiltoniano (6). En la práctica, sin embargo, esta tarea puede resultar bastante complicada cuando  $S \gg 1$ . En la década de los años 80 del siglo XX, se desarrollaron diversos métodos, basados en aproximaciones válidas en el límite casi-clásico, como la WKB [45] o la integral de camino [46, 47]. Por su sencillez, uso aquí una aproximación diferente [48, 49], basada en una aplicación de la teoría de perturbaciones independientes del tiempo. Según esta teoría, el desdoblamiento  $\Delta_m$  inducido por la perturbación  $\mathcal{H}_1 = -E(S_x^2 - S_y^2)$  se puede calcular usando la denominada “regla de la cadena”[48]

$$\Delta_m = \langle +m | \mathcal{H}_1 \frac{1}{\mathcal{H}_0 - E_0(m)} \mathcal{H}_1 \frac{1}{\mathcal{H}_0 - E_0(m)} \mathcal{H}_1 \frac{1}{\mathcal{H}_0 - E_0(m)} \dots \mathcal{H}_\infty | -\hat{m} \rangle \quad (7)$$

donde  $E_0(m) = -Dm^2$  es la energía no perturbada del estado  $|m\rangle$ . Como  $S_x = (S_+ + S_-)/2$  y  $S_y = (S_+ - S_-)/2i$ , donde  $S_+$  y  $S_-$  son los operadores “escalera” que aumentan o disminuyen la componente  $S_z$  en una unidad al actuar sobre un estado  $|m\rangle$ , se sigue que el desdoblamiento  $\Delta_m$  aparece en teoría de perturbaciones de orden  $2m/n$ , donde  $n$  es el orden de la perturbación  $\mathcal{H}_1$ . En el caso de distorsión ortorrómbica ( $n = 2$ ), se sigue que

$$\Delta_m = \frac{8D}{[(m-1)!]^2} \frac{(S+m)!}{(S-m)!} \left( \frac{E}{16D} \right)^m \quad (8)$$

El desdoblamiento depende pues exponencialmente del valor de  $m$ , como se muestra en la Fig. 6. Si pensamos en una nanopartícula ferromagnética, donde  $S \propto V$ , la observación experimental de  $\Delta_S$  se hace enormemente difícil cuando su tamaño aumenta por encima de unos pocos átomos, de acuerdo con el principio de correspondencia. La magnitud de  $\Delta_S$  no sólo pone límites a su medida directa, sino que contribuye, de manera decisiva, a la fragilidad de los fenómenos cuánticos frente a las perturbaciones ejercidas por el entorno, es decir, a los diferentes mecanismos de decoherencia.

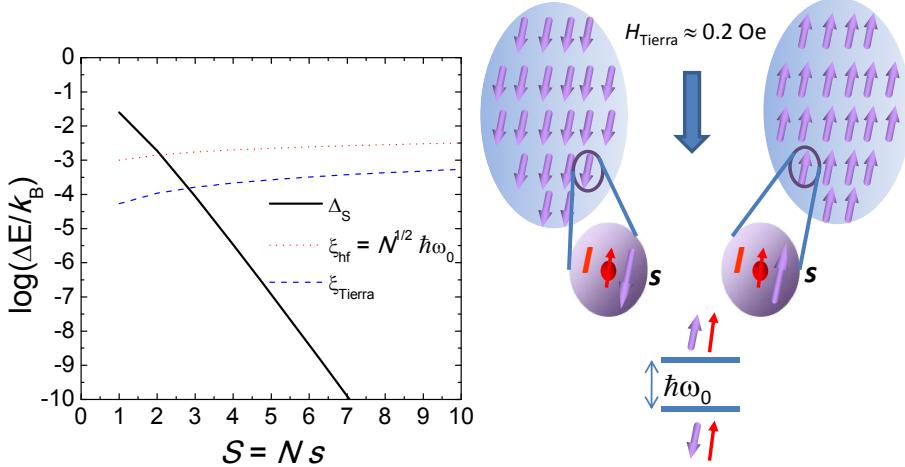


Figura 6.— Desdoblamiento por efecto túnel  $\Delta_S$  de un monodominio magnético en función de su espín  $S$ . Los cálculos se han realizado mediante la Ec. (8) usando  $D/k_B = 0,25$  K y  $E/D = 0,1$ . Se muestran también las diferencias de energía (bias efectivo) entre los estados  $|\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$  inducidas por la interacción con el campo magnético de la Tierra ( $\xi_{\text{Tierra}} = 2g\mu_B SH_{\text{Tierra}}$ , con  $g = 2$  y  $H_{\text{Tierra}} \sim 0,2$  Oe) y con los espines nucleares de los  $N$  átomos que forman el monodominio ( $\xi_{hf} \sim N^{1/2} \hbar\omega_0$ , donde  $\hbar\omega_0/k_B = 10^{-3}$  K es un desdoblamiento hiperfino típico). Por sencillez, se ha considerado el caso en que  $s = 1$ , es decir,  $N = S$ .

### 2.3. Modelo sencillo de efecto túnel: sistema de dos niveles. Decoherencia.

Para ilustrar esta idea, resulta conveniente considerar un sistema de dos estados, es decir, un espín efectivo  $s = 1/2$  descrito por el Hamiltoniano siguiente

$$\mathcal{H} = -\Delta s_x + \xi s_z \quad (9)$$

La Ec. (9) proporciona una descripción adecuada de la Física de un espín anisótropo, independientemente del origen del desdoblamiento túnel  $\Delta$  y de la mayor o menor complejidad de los términos de anisotropía, en el límite de baja temperatura, es decir, cuando  $\Omega_0 \gg k_B T$  y sólo dos estados (“espín arriba”  $|\uparrow\rangle$  y “espín abajo”  $|\downarrow\rangle$ ) están poblados. La energía de “bias”  $\xi \simeq 2g\mu_B H_z S$  mientras que el efecto de los campos transversales  $H_x$  y  $H_y$  se integra en el valor de  $\Delta$ . Los autovalores de (9) son  $E_{\pm} = \pm(1/2)(\Delta^2 + \xi^2)^{1/2}$ .

La Fig. 7 muestra las energías y autoestados en función del cociente  $\xi/\Delta$ . En la situación simétrica, es decir, cuando  $\xi = 0$ , los autoestados  $|\psi_{\pm}\rangle$  son superposiciones simétricas y antisimétricas de los estados localizados (o clásicos)  $|\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$ , cuyas energías difieren por la cantidad  $\Delta$ . En la misma Fig. 7 se muestra también la evolución temporal, calculada usando la Ec. de Schrödinger, a partir de un estado inicial  $|\psi(t=0)\rangle = |\uparrow\rangle$ , y que muestra una oscilación periódica (denominada efecto túnel coherente) entre ambas orientaciones del espín. Esta situación constituye una situación análoga, para un espín, del ejemplo arquetípico de coherencia cuántica en el mundo microscópico: la molécula de

NH<sub>3</sub>.

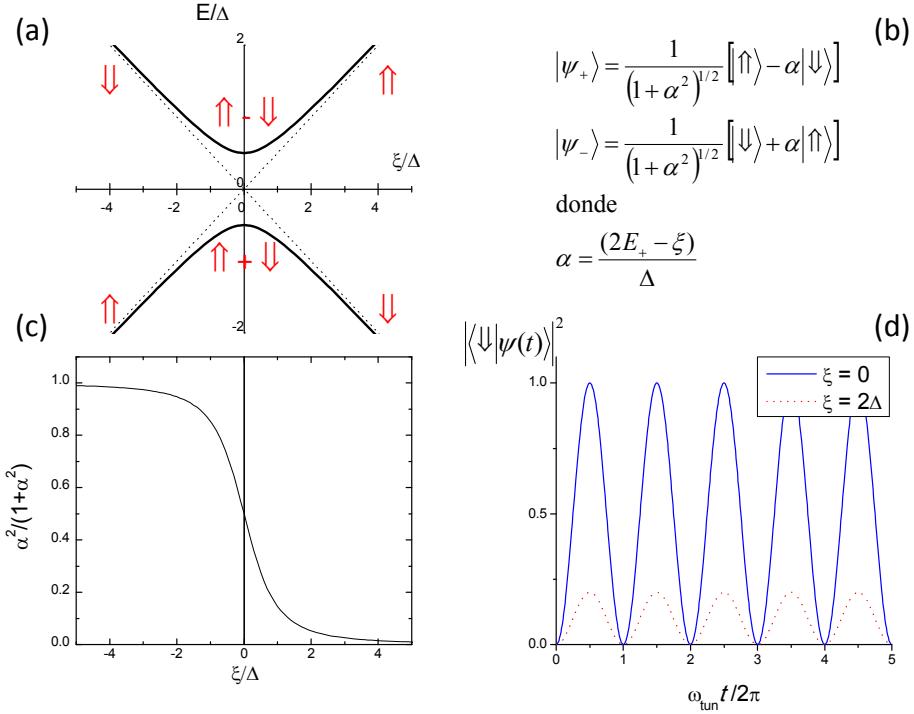


Figura 7.— (a) Autovalores de la energía  $E_{\pm}$  de un sistema de dos niveles descrito por la Ec. (9). Los correspondientes autoestados, que se muestran en (b), son superposiciones de las orientaciones “clásicas”  $\uparrow$  y  $\downarrow$  del espín. En (c) se representa en función del cociente  $\xi/\Delta$  el parámetro  $\alpha$ , definido en (b), que mide el grado de superposición entre estas dos orientaciones. Cuando  $\xi = 0$ , los autoestados son las superposiciones simétrica y antisimétrica de  $\uparrow$  y  $\downarrow$ , tiendiendo hacia estos estados clásicos a medida que aumenta  $|\xi/\Delta|$ . En (d) se muestra la oscilación de la probabilidad de encontrar el espín apuntando “hacia abajo” si inicialmente se ha preparado en el estado  $\uparrow$ . Se observa que la amplitud de este efecto túnel coherente decrece rápidamente al aumentar  $|\xi/\Delta|$ .

Los autoestados  $|\psi_{\pm}\rangle$  y la oscilación coherente del espín que deriva de ellos, dependen fuertemente del bias  $\xi$ . El coeficiente  $\alpha$ , que como muestra la Fig. 7 determina el solapamiento entre las funciones de onda del Hamiltoniano, se approxima rápidamente a 1 ( $\xi < 0$ ) ó a 0 ( $\xi > 0$ ) a medida que aumenta el cociente  $|\xi|/\Delta$ . Como resultado, los autoestados de la energía tienden asintóticamente hacia los estados clásicos y la amplitud de la oscilación coherente se desvanece (nótese, sin embargo, que la frecuencia sigue siendo  $\omega_{\text{tun}} = (E_+ - E_-)/\hbar$  y que, por tanto, aumenta con  $\xi$ ).

Este sencillo modelo permite obtener una primera impresión acerca del efecto de la decoherencia. El efecto túnel coherente, es decir, los estados superposición y las oscilaciones del espín, sobrevive tan sólo en la estrecha ventana energética  $|\xi| \lesssim \Delta_S$ . Teniendo en cuenta la minúscula magnitud de  $\Delta_S$  (ver Fig. 6), es fácil entender que esta relación restringe la existencia de este fenómeno al ámbito de materiales magnéticos formados por unos pocos átomos. En todo material existen perturbaciones que juegan el papel de campos de

“bias” que, por tanto, rompen la coherencia cuántica. Entre ellas, se encuentran el acople con otros espines, por ejemplo la interacción dipolar entre nanopartículas magnéticas, y la interacción Zeeman con el campo magnético,  $H_{\text{Tierra}} \sim 0,2$  Oe, generado por nuestro planeta. A pesar de ser un campo débil, el bias asociado a él  $\xi_{\text{Tierra}} \simeq 2g\mu_B SH_{\text{Tierra}}$  es, sin embargo, mucho mayor que  $\Delta_S$  para espines  $S \gtrsim 3 - 4$ .

En principio, es posible realizar experimentos sobre nanopartículas individuales [50] y apantallar de manera eficiente los campos magnéticos externos. Sin embargo, incluso en esta situación, el espín no puede considerarse como aislado (en el sentido de que  $\xi = 0$ ), ya que existen grados de libertad microscópicos de la propia partícula que influyen sobre él. Como se ilustra en la Fig. 6, la interacción hiperfina con espines nucleares  $I$ , presentes bien en los núcleos de los propios átomos magnéticos o bien en otros de su entorno [51], produce un desdoblamiento energético  $\hbar\omega_0$  entre las orientaciones de cada espín atómico  $s$ , que se traduce a su vez en una diferencia de energía  $\xi_{\text{hf}}$  entre las orientaciones del espín neto de la partícula. Las interacciones hiperfinas introducen, por tanto, una distribución de bias  $\xi_{\text{hf}}$ , cuya anchura, o energía característica es del orden de  $N^{1/2}\hbar\omega_0$ , donde  $N$  es el número de espines nucleares. A pesar de que la interacción hiperfina es débil ( $\hbar\omega_0 \sim 10^{-3} - 10^{-1}$  K), un reducido número de espines nucleares es capaz de bloquear por completo la posibilidad de observar coherencia cuántica.

Además de estas perturbaciones estacionarias, existen otras, como las vibraciones de la red cristalina, es decir, los fonones, que pueden inducir transiciones entre diferentes estados de la energía, contribuyendo así al establecimiento del equilibrio térmico [52, 53, 54, 55, 56]. Como consecuencia, los estados del Hamiltoniano (6) adquieren un tiempo de vida finito  $\tau_m$ , análogo al prefactor  $\tau_0$  de la ley de Arrhenius (de hecho,  $\tau_0 \sim \tau_{m=0}$ ), y una anchura, o indeterminación en energía  $\delta E \sim \hbar/\tau_0$ .

De estos argumentos, se deduce un panorama bastante descorazonador para la observación de coherencia cuántica en espines. Sin embargo, como demuestran los experimentos descritos en la sección 3 siguiente, existen otros fenómenos, asociados también al efecto túnel, que son mucho más robustos frente a la decoherencia y que se ven incluso reforzados por ciertas interacciones con el entorno. Antes de pasar a describir los experimentos, el apartado siguiente describe un modelo sencillo que permite ilustrar algunas ideas básicas relacionadas con este efecto túnel incoherente.

#### 2.4. *Modelo de Landau-Zener: efecto túnel incoherente.*

El modelo, derivado del anterior, considera un sistema de dos estados, como el descrito por el Hamiltoniano (9), sometido a un bias que varía linealmente con el tiempo  $\xi(t) = v_\xi t$  a partir de un valor inicial  $\xi(t=0) \equiv \xi_0 < 0$ . A diferencia del caso estático, la condición de “resonancia”  $|\xi| \lesssim \Delta_S$  se verifica en el instante  $t \simeq \xi_0/v_\xi$ . Durante un periodo  $\Delta t \sim \Delta_S/v_\xi$

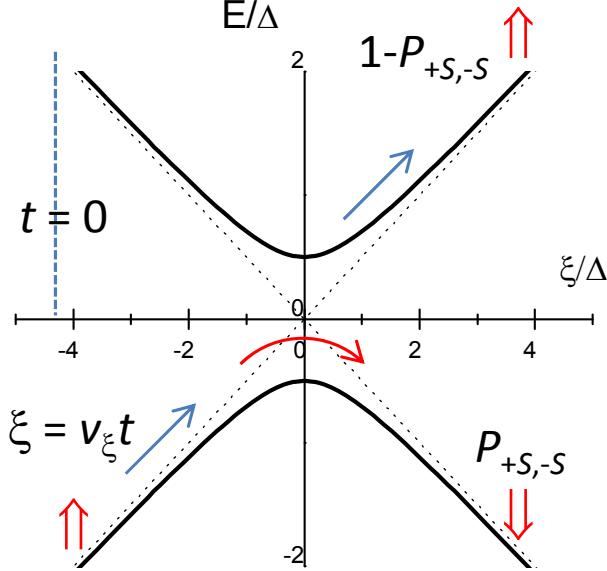


Figura 8.— Representación esquemática del modelo de Landau-Zener. En el instante inicial,  $t = 0$ , se prepara al espín en su estado  $\uparrow\uparrow$ , aplicando un campo de bias  $\xi_0 < 0$ . A partir de este instante, la energía de bias  $\xi$  se barre a velocidad constante  $v_\xi$ . Tras el (anti-)cruce de niveles de energía que tiene lugar en  $\xi = 0$ , el espín permanece en su estado inicial con probabilidad  $1 - P_{+S,-S}$  y se invierte, por efecto túnel incoherente, con probabilidad  $P_{+S,-S}$ , dada por la Ec. (10).

el espín adquiere una cierta probabilidad de invertirse, por efecto túnel. El proceso global es, sin embargo, irreversible y no se producen oscilaciones coherentes. Si inicialmente el espín se encuentra en el estado  $|\uparrow\uparrow\rangle$ , tras el cruce ( $t \gg \xi/v_\xi$ ) el espín, o bien se habrá invertido con probabilidad  $P_{+S,-S}$ , o bien permanecerá en el estado inicial, con probabilidad  $1 - P_{+S,-S}$ . En 1932, Landau y Zener calcularon esta probabilidad de manera independiente [57, 58], encontrando la expresión siguiente

$$P_{+S,-S} = 1 - \exp\left(-\frac{\pi\Delta_S^2}{2\hbar v_\xi}\right) \quad (10)$$

que lógicamente aumenta a medida que crece  $\Delta_S$  y disminuye  $v_\xi$ . En el caso, bastante habitual en las condiciones del laboratorio, en que  $\Delta_S \ll 2\hbar v_\xi$  la Ec. (10) se puede aproximar por la siguiente

$$P_{+S,-S} \simeq \frac{\pi\Delta_S^2}{2\hbar v_\xi}. \quad (11)$$

La Ec. (11) ofrece un método para medir diminutos desdoblamientos energéticos  $\Delta_S \sim 10^{-7}$  K que son imposibles de detectar de manera directa. Experimentalmente, la probabilidad  $P_{+S,-S}$  se puede extraer a partir de cambios en la imanación medidos en experimentos en los que el campo magnético induce un cruce entre niveles asociados a orientaciones opuestas del espín. Cuando el estado final, tras la inversión del espín, es un estado metaestable (por ejemplo un estado excitado con una vida media finita), el efecto túnel da

lugar a un proceso netamente irreversible. Este fenómeno resulta entonces análogo a otros ejemplos de “escape” por efecto túnel, como la desintegración alfa de núcleos pesados (ver la Fig. 1, panel derecho).

### 3. Efecto túnel resonante en moléculas-imán

En 1954, L. Weil [59] observó que la tasa promedio de relajación, o viscosidad, magnética en nanopartículas de Ni parecía ser independiente de la temperatura, desviándose del comportamiento esperado y comúnmente observado cuando los espines se invierten por activación térmica [Ec. (4)]. Estos experimentos aportaron las primeras indicaciones de que el efecto túnel podría dominar la relajación magnética a bajas temperaturas [60]. En los años 90, un buen número de experimentos mostraron un similar cambio de comportamiento, de una relajación activada térmicamente a otra independiente de  $T$ , en materiales diversos, incluyendo nanopartículas, capas delgadas, aleaciones amorfas e incluso superconductores de alta temperatura crítica. En el último caso, la relajación magnética se atribuyó al efecto túnel de fluxones. Resúmenes detallados de estos experimentos pueden encontrarse en las monografías de las referencias [61] y [62].

Su interpretación es, sin embargo, compleja. Los materiales citados presentan una enorme dispersión de tiempos de relajación, como consecuencia de las inevitables distribuciones de tamaños y formas, en el caso de partículas, la presencia de defectos o el carácter amorfico, por citar sólo algunos aspectos relevantes. La complejidad inherente a los materiales estudiados impide la comparación directa entre los resultados experimentales y predicciones teóricas para relajación por efecto túnel y, en general, no permite excluir interpretaciones alternativas, dentro del marco de la física clásica [63, 64].

Un gran avance en este campo ha sido posible gracias al desarrollo de nuevos materiales magnéticos moleculares, comúnmente denominados moléculas-imán (“single-molecule magnets.” en inglés). Estas moléculas son, en muchos aspectos y a una menor escala de tamaño, análogas a nanopartículas magnéticas con la enorme ventaja de ser monodispersas. En esta sección se describen brevemente las propiedades básicas de estos materiales y los resultados experimentales que llevaron al descubrimiento, en 1996, del efecto túnel resonante de espín.

#### 3.1. Moléculas-imán

La síntesis química (o “bottom-up”) de materiales magnéticos ofrece la atractiva posibilidad de que las propiedades magnéticas pueden modificarse mediante el diseño químico de sus moléculas constituyentes [65, 66, 67]. Dentro de la familia de materiales magnéticos moleculares, destacan, por su interés en el estudio del efecto túnel de espín, macromoléculas, o clusters metalorgánicos, formadas por un elevado número de átomos magnéticos

encapsulados dentro de una nube de moléculas orgánicas [68, 69]. El primer cluster de este tipo, y también el más famoso, fue sintetizado en 1980 [70]. Su fórmula química es  $[\text{Mn}_{12}\text{O}_{12}(\text{O}_2\text{CCH}_3)_{16}(\text{H}_2\text{O})_4]\cdot 4\text{H}_2\text{O}\cdot 2\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}$ , aunque comúnmente se le conoce como  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$  o acetato de  $\text{Mn}_{12}$ . Su estructura molecular se muestra en la Fig. 9. El “core” magnético está formado por 4 iones de  $\text{Mn}^{4+}$  rodeados por un anillo de 8 iones de  $\text{Mn}^{3+}$  y unidos entre sí mediante iones de  $\text{O}^{2-}$ . La fuerte interacción de superintercambio da lugar a un estado de espín neto  $S = 10$  para el cluster, resultado del acople antiferromagnético entre los iones de diferente estado de oxidación:  $S = [(8 \text{ Mn}^{3+}) \times (s = 2)] - [(4 \text{ Mn}^{4+}) \times (s = 3/2)]$ . Este core está rodeado y, por tanto, aislado magnéticamente del resto, por ligandos orgánicos. Los clusters de  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$  son entidades neutras que forman cristales moleculares de simetría tetragonal, como se muestra a la derecha de la Fig. 9. Durante las dos últimas décadas, se ha sintetizado una enorme variedad de clusters moleculares de similares características, formados por un número variable (típicamente entre 1 y 80) de iones magnéticos de Mn, Fe, Co, Ni, V e incluso tierras raras [67, 68, 69] y con diversos ligandos orgánicos. Estos nanomateriales moleculares permiten investigar el magnetismo en la región intermedia entre los átomos y las nanopartículas (ver Fig. 2), con la apreciable ventaja de ser monodispersos en tamaño.

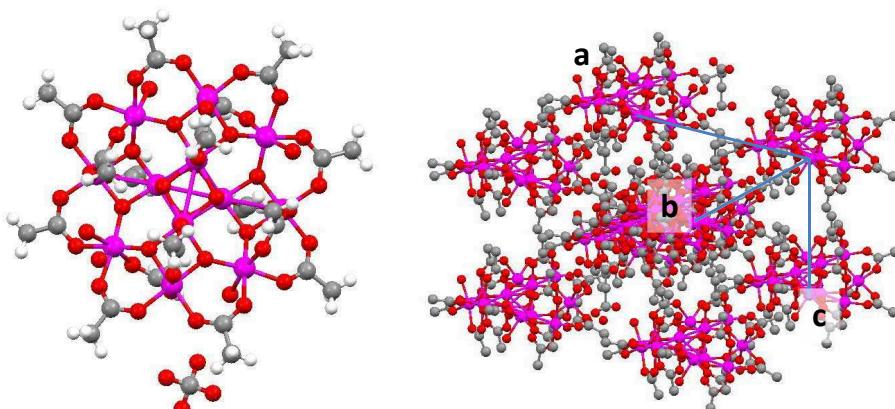


Figura 9.— Izquierda: Cluster molecular de  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$ . Los átomos de Mn se representan en color rosa, los de O en rojo, los de C en gris y los de H en blanco. Derecha: Los clusters de  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$  forman un cristal molecular de simetría tetragonal.

La analogía entre los clusters moleculares y las nanopartículas magnéticas se vio reforzada por el descubrimiento, realizado en 1993 por R. Sessoli y colaboradores [71], de histéresis magnética en cristales de  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$  a temperaturas próximas a las del Helio líquido. Por este motivo, a estas moléculas se las bautizó con el nombre de “moléculas-imán” (“single-molecule magnets.” en inglés). Este descubrimiento despertó un considerable interés, puesto que mostraba la posibilidad de almacenar información en bits magnéticos a escala molecular. La histéresis se debe a la fuerte anisotropía magnética de los iones de  $\text{Mn}^{3+}$ , originada a su vez por la distorsión Jahn-Teller de su esfera de co-ordinación

(un octaedro de 6 iones  $O^{2-}$ ). Los ejes de distorsión de los 8 iones  $Mn^{3+}$  son paralelos entre sí dando lugar a una anisotropía neta para el espín molecular, de carácter predominantemente uniaxial. El Hamiltoniano de espín del  $Mn_{12}$  está dado, al menos en primera aproximación, por

$$\mathcal{H} = -DS_z^2 + A_4 S_z^4 + C (S_+^4 + S_-^4) - g\mu_B \mathbf{SH} \quad (12)$$

que es compatible con la simetría tetragonal de la molécula. Los parámetros de anisotropía  $D/k_B = 0,58(2)$  K,  $A_4/k_B = -1,0(1) \times 10^{-3}$  K y  $C/k_B = 2,2(2) \times 10^{-5}$  K han sido determinados mediante experimentos de resonancia paramagnética y de dispersión inelástica de neutrones [72, 73, 74, 75]. El factor giromagnético  $g = 1,9$ , por lo que cada molécula presenta un momento magnético  $\mu \simeq 19\mu_B$ . La estructura resultante de niveles de energía se muestra en la Fig. 10.

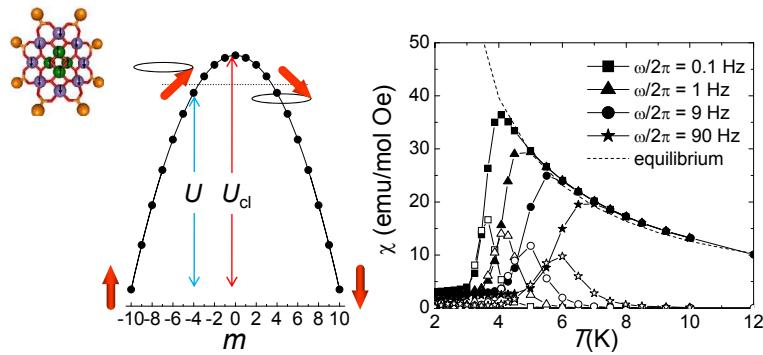


Figura 10.— Izquierda: Estructura de niveles de energía magnéticos de  $Mn_{12}Ac$  en función de la proyección  $m$  de su espín a lo largo del eje de anisotropía. Se indican en la figura la energía de activación clásica  $U_{cl}$  y la energía de activación  $U$  determinada experimentalmente. El inset muestra la estructura magnética del cluster. Derecha: Susceptibilidad magnética ac de  $Mn_{12}Ac$  en función de la temperatura medida a diferentes frecuencias  $\omega/2\pi$  del campo de excitación. La línea discontinua indica la susceptibilidad de equilibrio  $\chi_T$ , que sigue aproximadamente la ley de Curie-Weiss  $\chi_T = N_A(g\mu_B S)^2/k_B(T-\theta)$ , característica de un espín anisótropo [76]. La temperatura de Weiss  $\theta \simeq 1$  K mide la intensidad de las interacciones dipolares entre las moléculas en el cristal.

La inversión del espín está asociada al salto de una barrera de energía  $U_{cl}/k_B = DS^2 + |A_4|S^4 \simeq 68$  K. Como muestra la misma Fig. 10, a bajas temperaturas, es decir cuando  $k_B T \ll U_{cl}$ , la existencia de esta barrera energética da lugar al bloqueo superparamagnético de la susceptibilidad ac  $\chi$ , que también se observa en el caso de sistemas de nanopartículas magnéticas. La componente en fase (o real)  $\chi'$ , se desvía de la susceptibilidad de equilibrio  $\chi_T$  a una temperatura que depende de la frecuencia  $\omega/2\pi$  del campo de excitación  $h_{ac} = h_0 \cos(\omega t)$ . Asociado a este bloqueo superparamagnético, se produce la aparición de una componente fuera de fase  $\chi''$ .

A cada temperatura, la dependencia de la susceptibilidad con la frecuencia puede describirse mediante una ley de Debye, característica de un sistema de espines con un único tiempo  $\tau$

$$\chi' = \chi_S + \frac{\chi_T - \chi_S}{1 + (\omega\tau)^2} \quad (13)$$

$$\chi'' = \omega\tau \frac{\chi_T - \chi_S}{1 + (\omega\tau)^2} \quad (14)$$

donde  $\chi_S$  es el límite adiabático, o de frecuencia infinita, de la susceptibilidad. En un espín anisótropo, como el de la molécula de  $Mn_{12}Ac$ ,  $\chi_S = \chi_\perp (\sin \psi)^2$ , donde  $\chi_\perp$  es la susceptibilidad transversal, es decir, perpendicular al eje de anisotropía, y  $\psi$  es el ángulo que el campo  $h_{ac}$  forma con dicho eje. La Fig. 11 muestra datos experimentales de  $\chi'$  y  $\chi''$  medidos a diferentes temperaturas en muestras de dos variedades distintas,  $Mn_{12}Ac$  y  $Mn_{12}2-ClBz$ , del cluster de  $Mn_{12}$  [77]. Los datos se han representado frente a escalas normalizadas para mostrar el buen acuerdo con las predicciones de las leyes de Debye (13) y (14). Este hecho, que muestra la estrecha distribución de tiempos de relajación asociada con el carácter monodisperso de las muestras, contrasta radicalmente con los resultados que se obtienen sobre muestras de nanopartículas magnéticas [36, 60], en las que es común encontrar dispersiones de tiempos de relajación que abarcan muchas décadas.

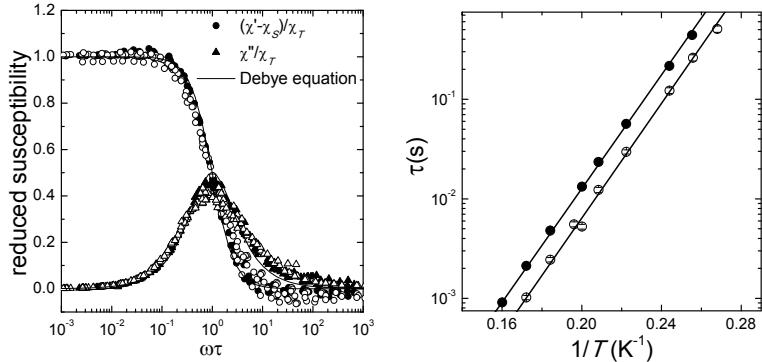


Figura 11.— Izquierda: Componentes real e imaginaria de la susceptibilidad compleja reducida  $(\chi^* - \chi_S)/(\chi_T - \chi_S)$ , donde  $\chi^* \equiv \chi' - i\chi''$ , medida entre  $T = 3,7$  K y  $6$  K en un rango de frecuencias comprendido entre  $2,5 \times 10^{-2}$  Hz y  $1,5 \times 10^3$  Hz. Los símbolos sólidos y abiertos corresponden, respectivamente, a datos medidos sobre dos variedades diferentes de  $Mn_{12}$ :  $Mn_{12}Ac$  y  $Mn_{12}2-ClBz$ . Derecha: Dependencia con la temperatura del tiempo de relajación  $\tau$ . Las líneas son ajustes de mínimos cuadrados a una ley de Arrhenius [Ec.(4)] de los que se obtiene  $U/k_B = 65(1)$  K para los dos compuestos y  $\tau_0 = 3(1) \times 10^{-8}$  s y  $\tau_0 = 1(1) \times 10^{-8}$  s para  $Mn_{12}Ac$  y  $Mn_{12}2-ClBz$ , respectivamente.

Del ajuste de los datos experimentales, o bien de la posición del máximo de  $\chi''$  que tiene lugar cuando se cumple la condición  $\omega\tau = 1$ , se puede obtener el tiempo de relajación

$\tau$ . Tal y como muestra la Fig. 11, este tiempo aumenta exponencialmente a medida que la temperatura desciende, de acuerdo con la ley de Arrhenius (4). Para temperaturas por debajo de 3 K,  $\tau > 100$  s lo que conduce a histéresis magnética en los tiempos de observación del laboratorio. En principio, y aparte de la extremadamente estrecha distribución de tiempos de relajación, estos resultados parecen indicar que la relajación tiene lugar por el mecanismo clásico de activación térmica. Existen, sin embargo, indicios que apuntan a la existencia de desviaciones con respecto a este comportamiento clásico. Por un lado, la energía de activación determinada experimentalmente  $U/k_B \simeq 64(1)$  K es apreciablemente menor que la barrera de energía clásica  $U_{\text{cl}}/k_B = 68(2)$  K. Por otro, la histéresis magnética en  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$  resulta ser bastante poco convencional.

### 3.2. Efecto túnel resonante por estados excitados: $\text{Mn}_{12}$

Una ventaja adicional de los cristales de moléculas imán es que, como ocurre en el caso del  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$ , a menudo los ejes de anisotropía de todas las moléculas están alineados a lo largo de una dirección cristalográfica dada (el eje  $c$  en el caso del  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$ ). Este efecto permite, como se muestra en la Fig. 12 llevar a cabo experimentos en los que el campo magnético se alinea en una dirección determinada con respecto a dicho eje, igual para todas las moléculas del cristal. De este modo, es posible obtener información acerca de la respuesta magnética de moléculas individuales a partir de técnicas de caracterización macroscópicas.

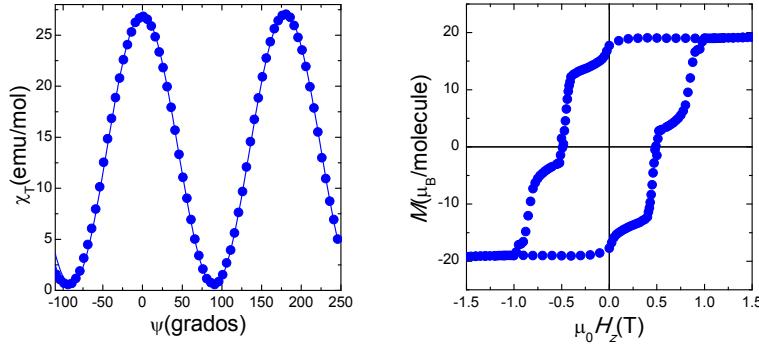


Figura 12.— Izquierda: Susceptibilidad de equilibrio de un monocrystal del derivado  $\text{Mn}_{12}\text{-tBu}$  medida a  $T = 4,8$  K en función del ángulo  $\psi$  que el campo magnético  $h_{\text{ac}}$  forma con el eje de anisotropía, común para todas las moléculas [78]. La línea continua es un ajuste a la expresión, característica de un espín con anisotropía uniaxial [76],  $\chi_T = \chi_{\parallel}(\cos \psi)^2 + \chi_{\perp}(\sin \psi)^2$ , donde  $\chi_{\parallel}$  y  $\chi_{\perp}$  denotan las susceptibilidades longitudinal y transversal, respectivamente. A la derecha se muestra el ciclo de histéresis de un monocrystal de  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$ , medido a  $T = 2,5$  K.

En la Fig. 12, se muestra el ciclo de histéresis de un monocrystal de  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$  medido al barrer un campo magnético  $\mathbf{H}$  paralelo al eje de anisotropía. En contraste con los ciclos de histéresis de un imán macroscópico, el de  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$  muestra “saltos.” abruptos a

determinados valores de campo magnético  $H_n \simeq nH_1$ , donde  $H_1 \simeq 4,5$  kOe [79, 80, 81]. Entre dos saltos consecutivos, existen regiones ("plateaus") en los que la imanación varía mucho más lentamente con el cambio de  $H$ . Como veremos a continuación, la existencia de estos escalones en las curvas de imanación está directamente relacionado con el carácter discreto, típico de la física cuántica, del espectro de niveles de energía magnéticos del  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$  (Fig. 10).

Puesto que la histéresis tiene su origen en la evolución temporal de la imanación hacia su estado de equilibrio, resulta especialmente esclarecedor estudiar la relajación magnética en función del campo. Como se describe en el apartado 3.1 anterior, es posible determinar el tiempo de relajación, a cada campo y temperatura, a partir de medidas de la susceptibilidad ac en función de la frecuencia. Debido a la diferencia en las escalas de tiempo características de ambas técnicas experimentales (del orden de  $t \sim 10 - 100$  s en el caso de experimentos de imanación, frente a  $t \equiv 1/\omega \sim 10^{-4} - 10$  s para experimentos de susceptibilidad ac), las medidas de susceptibilidad se llevan a cabo a temperaturas  $T > 3\text{K}$ , para asegurar que la condición  $\omega\tau = 1$  se verifique dentro del rango de frecuencias accesible [80, 82]. Como muestra la Fig. 13, la susceptibilidad  $\chi'$  presenta máximos a los mismos valores de  $H_z = nH_1$  en los que se observan saltos en la imanación<sup>2</sup>. Este resultado sugiere que, cerca de cada campo  $H_n$ , los espines se aproximan a su estado de equilibrio térmico de manera más rápida que para campos intermedios.

Esta interpretación se ve confirmada directamente por la medida de  $\tau$  que, como muestra la Fig. 13, presenta mínimos acusados centrados en los mismos  $H_z = H_n$  [80, 81]. En la misma figura, se muestra también la variación de  $\tau$  calculada con las Ecs. (4) y (3), válidas para un momento magnético clásico con el mismo valor de  $U_{\text{cl}}$ . Esta predicción muestra un decrecimiento monótono de  $\tau$  al aumentar el campo, en claro conflicto con los resultados experimentales.

A la luz de estos experimentos, es posible asignar este intrigante fenómeno a la existencia de efecto túnel de espín. El panel superior derecho de la Fig. 13 muestra la dependencia con  $H_z$  de los  $2S + 1 = 21$  niveles de energía asociados a diferentes orientaciones  $m$  del espín. Debido al término de Zeeman (el cuarto de la Ec.(12)), niveles correspondientes a

---

<sup>2</sup>De hecho, el espacio entre dichos máximos es de 4,25 kOe, algo menor que el observado en los ciclos de histéresis. La diferencia se debe a la existencia de interacciones dipolares magnéticas entre los espines de moléculas vecinas [83, 84]. El campo magnético medio  $H_m = \lambda_m M$  asociado a estas interacciones depende de la imanación  $M$  de la muestra, que es diferente en ambos tipos de experimentos: en el caso de susceptibilidad ac,  $M(H_z \simeq H_1)$  es cercana a la saturación  $M_s = g\mu_B S$ , mientras que en el caso de medidas de histéresis  $M$  resulta ser cercana a cero o incluso ligeramente negativa. El parámetro de campo medio  $\lambda_m \simeq 5,2$  kOe cm<sup>3</sup>/emu se puede obtener experimentalmente midiendo el campo  $H_1(M)$  al que tiene lugar del salto en imanación en barridos sucesivos, realizados en direcciones opuestas y en torno a  $H_z = H_1$ , del campo magnético. De esta forma, se obtiene también el valor intrínseco de  $H_1 = 4,45(5)$  kOe.

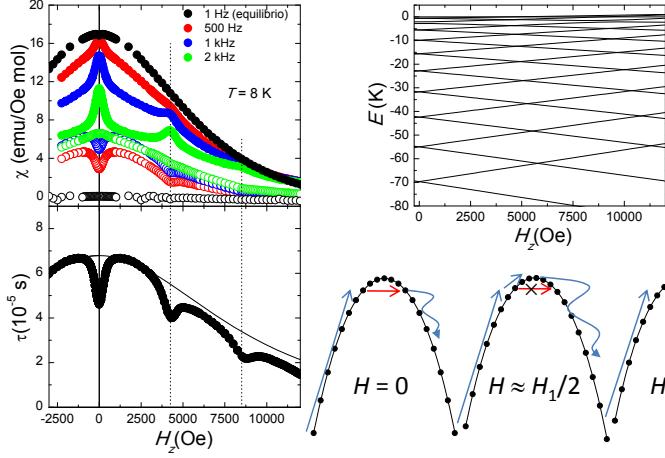


Figura 13.— Izquierda: Susceptibilidad ac de un monocrystal de  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$  medida, a  $T = 8$  K, en función del campo  $H_z$  y a diversas frecuencias. En el panel de abajo, se muestra el tiempo de relajación magnética  $\tau$ . La línea continua representa la predicción clásica [30], obtenida mediante las Ecs. (4) y (3). Derecha: Esquema de niveles de energía de  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$ . A los campos de cruce, la posibilidad de efecto túnel resonante entre algunos estados de espín reduce la energía de activación  $U$ . En campos intermedios,  $U$  se acerca a su valor clásico.

$m$  y  $-m - n$  se cruzan en un campo magnético  $H_{n,m}$  dado por la expresión siguiente [49]

$$H_{n,m} = n \frac{D}{g\mu_B} \left\{ 1 + \frac{A_4}{D} [m^2 + (m+n)^2] \right\} \quad (15)$$

Como se describe en las secciones 2.2 y 2.3 anteriores, la presencia de términos no diagonales en el Hamiltoniano (12) hace que, cerca de un cruce de niveles, sea posible el efecto túnel de espín entre los estados casi degenerados  $-m - n$  y  $+m$ . La Fig. 13 muestra esquemáticamente como este proceso de túnel reduce, de manera efectiva, la barrera de energía que el espín debe remontar para invertir su orientación. Para campos intermedios, el efecto túnel está bloqueado por la desintonización energética entre estados a ambos lados de la barrera. Como resultado, la energía de activación  $U$ , y por tanto también  $\tau$ , se aproximan a las predicciones de la física clásica (ver Fig. 13). El campo  $H_1 \simeq 4,45$  kOe medido experimentalmente es próximo, teniendo en cuenta la incertidumbre en el valor experimental de  $D$ , al campo de cruce  $H_1 \simeq D/g\mu_B = 4,55$  kOe entre estados de espín cercanos al tope de la barrera (es decir, con  $m$  comprendido entre 1 y 3). El campo de cruce aumenta con  $m$ , debido a la presencia del término  $A_4 S_z^4$ . Este efecto da lugar a la existencia de saltos “satélite” cerca de las resonancias principales, uno de los cuales se adivina en la curva de la Fig. 12, y cuya presencia ha sido recientemente confirmada en experimentos realizados sobre muestras con muy alto grado de cristalinidad [85]. La dependencia térmica de  $\tau$  y, en particular, los valores de  $U$  determinados a campo nulo y a  $H = H_1$  confirman [82] que la relajación tiene lugar, al menos para  $T > 1,8K$ , por

efecto túnel entre estados excitados (aproximadamente  $m = \pm 3$  para  $H = 0$  y  $m = +2$  y  $m = -3$  para  $H = H_1$ ), que están poblados térmicamente.

A este fenómeno, que constituyó la primera evidencia incuestionable de la existencia de efecto túnel de un momento magnético [86, 87, 88], se le denominó por este motivo efecto túnel “resonante” de espín.

Resultados similares a los mostrados para el  $\text{Mn}_{12}$  han sido descritos, en trabajos posteriores, para un buen número de moléculas-imán [67]. La Fig. 14 muestra resonancias observadas en las curvas de susceptibilidad magnética del cluster  $[(\text{C}_6\text{H}_{15}\text{N}_3)_6\text{Fe}_8\text{O}_2(\text{OH})_{12}]$ , comúnmente denominado  $\text{Fe}_8$  [89], cuyo espín neto es también  $S = 10$ . El Hamiltoniano de espín de esta molécula viene dado por la Ec. (6) con  $D = 0,294$  K y  $E = 0,047$  K [91, 92]. De acuerdo con la expresión (15), el menor espacio entre los máximos  $H_1 \simeq 0,23$  kOe, comparado con casi el doble observado en el caso del  $\text{Mn}_{12}$ , se corresponde con la menor anisotropía del  $\text{Fe}_8$ . La baja simetría molecular tiene también una importante influencia sobre las probabilidades de efecto túnel, ya que permite la existencia de un término no diagonal de orden 2,  $E(S_x^2 - S_y^2)$ , relativamente intenso. Por este motivo, y como muestra la Fig. 14, el efecto túnel resonante tiene lugar, a campo nulo por estados  $m = \pm 5$  más próximos en energía al fundamental. La mezcla cuántica de los estados del multiplete fundamental  $S = 10$  con estados de multipletes excitados juega también un papel importante en la determinación de los desdoblamientos  $\Delta_m$  en  $\text{Fe}_8$  [90]. Este ejemplo ilustra como la síntesis química ofrece, en cierto modo, la posibilidad de diseñar el Hamiltonino magnético a través de la modificación de la estructura molecular.

#### 4. Teoría del efecto túnel resonante

Los experimentos descritos en la sección precedente admiten una explicación *cualitativa* en base al simple Hamiltoniano de espín dado por la Ec. (12). Sin embargo, una explicación *cuantitativa* requiere tener en cuenta, de manera realista, la interacción del espín con su entorno, es decir, con otras moléculas del cristal, con los espines nucleares y con las vibraciones, o fonones, de la red. Asimismo, los experimentos abren importantes cuestiones, entre las que destacan las dos siguientes: a) Por qué el efecto túnel tiene lugar, en el caso del  $\text{Mn}_{12}$ , por los estados  $m = \pm 3$  (a campo nulo) y no por estados de menor energía cuya población térmica es mucho mayor a cualquier temperatura? y b) tiene lugar alguna oscilación coherente del espín, similar a la que muestra la Fig. 7 entre  $m$  y  $-m-n$  durante el tiempo de vida  $\tau_0 \sim 10^{-7}$  s de estos estados excitados?

##### 4.1. Determinación del camino de efecto túnel

Responder a la primera cuestión es relativamente simple, teniendo en cuenta los argumentos que sobre el efecto de la decoherencia se introdujeron en la sección 2.3. Tomemos,

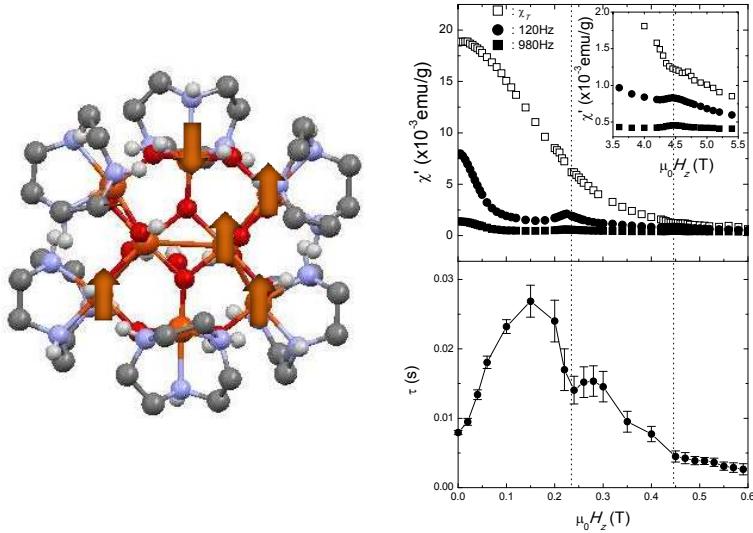


Figura 14.— Izquierda: Estructura molecular y magnética del cluster de Fe<sub>8</sub>. Los átomos de Fe se representan en naranja, los de C en gris, los de oxígeno en rojo y los de H en blanco. Derecha, arriba: Susceptibilidad ac de una muestra orientada de Fe<sub>8</sub>, medida a  $T = 2$  K con el campo paralelo al eje de anisotropía. Derecha, abajo: Tiempo de relajación magnética obtenido a partir del ajuste de las curvas de susceptibilidad mediante las Ecs. (13) y (14).

por sencillez, la situación existente a campo aplicado nulo ( $H_z = 0$ ). En principio, el efecto túnel puede tener lugar entre cualquier par de estados  $\pm m$ . Sin embargo, aún en ausencia de un campo externo, existen perturbaciones que introducen una energía de “bias”  $\xi$ , bloqueando, por tanto, el efecto túnel cuando  $|\xi| \gg \Delta_m$ , donde  $\Delta_m$  es el desdoblamiento por efecto túnel del doblete  $\pm m$ . Una de estas perturbaciones está asociada a la interacción dipolar magnética con los momentos magnéticos de moléculas vecinas. Recordemos que el Mn<sub>12</sub>, como todos los sistemas de moléculas-imán, cristaliza en una estructura ordenada (Fig. 9), en la que las interacciones dipolares pueden inducir un ordenamiento magnético de largo alcance a temperaturas inferiores a 1 K [83, 84]. En la fase paramagnética, dichas interacciones dipolares dan lugar a una distribución Gaussiana,  $P_{\xi_{\text{dip}}}$ , centrada en  $\xi_{\text{dip}} = 0$  pero con una anchura finita  $\sigma_{\text{dip}}$  [53]. La magnitud del campo dipolar típico  $H_{\text{dip}} = \sigma_{\text{dip}}/2g\mu_B S \sim 300$  Oe puede calcularse teóricamente para cada estructura cristalina [83] o estimarse [78, 93] a partir de la constante  $\theta$  de Weiss obtenida de la susceptibilidad de equilibrio  $\chi_T$  (veáse el pie de la Fig. 13). El valor preciso de  $H_{\text{dip}}$  no afecta de manera importante al argumento cualitativo que sigue aunque lógicamente sí modifica el valor cuantitativo del tiempo de relajación, como muestra un ejemplo que se discute más adelante, en la sección 7.

Además de las interacciones dipolares, las interacciones hiperfinas [51] contribuyen también al “bias” con una cantidad  $\xi_{\text{hf}}$  que se define en la Fig. 6. En el caso de la molécula de Mn<sub>12</sub>,  $\xi_{\text{hf}} \sim N^{1/2} \hbar \omega_0$  está dominado por la fuerte interacción hiperfina con los espines

nucleares de  $^{55}\text{Mn}$ , con  $I = 5/2$ . Usando  $\omega_0/2\pi \simeq 300$  MHz, estimado de experimentos de resonancia magnética nuclear [94, 95], y  $N = 12$  da como resultado  $\xi_{\text{hf}}/k_{\text{B}} \sim 0,05$  K, aproximadamente un orden de magnitud menor que  $\sigma_{\text{dip}}/k_{\text{B}} \sim 0,75$  K.

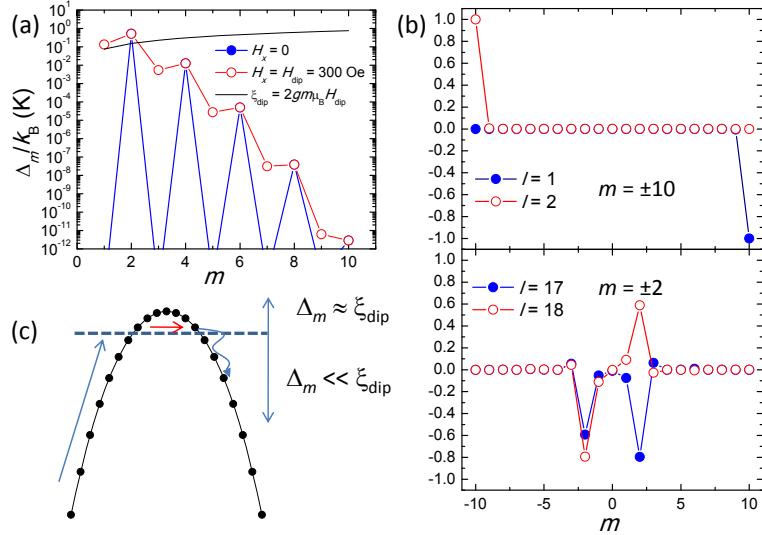


Figura 15.— (a) Comparación entre los desdoblamientos por efecto túnel calculados para todos los dobletes  $\Delta_m$  del  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$  y la energía de bias  $\xi_{\text{dip}}$  causada por las interacciones dipolares. Se muestran cálculos de  $\Delta_m$  realizados con dos valores de campo transversal  $H_x = 0$  y  $H_x = 300$  Oe  $\simeq H_{\text{dip}}$ , para ilustrar como la presencia de campos dipolares rompe la regla de selección  $m = \text{par}$  para el efecto túnel entre estados  $+m$  y  $-m$ . (b) Funciones de onda de autoestados del Hamiltoniano correspondientes a los dobletes  $\pm 10$  (doblete fundamental) y  $\pm 2$ . (c) La presencia de estados deslocalizados por debajo de la barrera de potencial abre un camino de efecto túnel y reduce, de manera efectiva la energía de activación  $U$ .

La Fig. 15 compara las escalas de energía de las interacciones dipolar e hiperfina, que acabamos de discutir, con los desdoblamientos por efecto túnel  $\Delta_m$  de todos los dobletes  $\pm m$  del  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$ , obtenidos mediante la diagonalización numérica del Hamiltoniano Eq. (12) con  $H = 0$ . La figura ilustra dos importantes aspectos, que conviene resaltar. El primero es el aumento, exponencial en  $m$ , del desdoblamiento por efecto túnel a medida que los niveles se aproximan al tope de la barrera. Para la inmensa mayoría de las moléculas en un cristal,  $\Delta_S$  del estado fundamental es muchos órdenes de magnitud menor que la energía dipolar  $\xi$ . La función de ondas  $|\psi_1\rangle$  de este estado coincide, por tanto, con alguno de los estados clásicos  $|+S\rangle$  ó  $| -S\rangle$  lo que implica, como se describe en la sección 2.3, que efecto túnel coherente está completamente bloqueado. La misma conclusión se aplica a estados excitados para los que  $\Delta_m$  continúa siendo  $\ll \xi$ . Sin embargo, el aumento de  $\Delta_m$  con la energía de los niveles puede eventualmente abrir un “canal.” “camino” de túnel. Por ejemplo, para el doblete  $\pm 2$ ,  $\Delta_m/k_{\text{B}} \simeq 0,5$  K es ya próxima a las energías asociadas a perturbaciones ejercidas por el entorno. Las funciones de onda de estos dos estados son ya

superposiciones de las orientaciones clásicas con un elevado grado de solapamiento, como muestra la Fig. 15(b).

El segundo aspecto relevante es que  $\Delta_m$  se anula para estados con  $m$  impar. La supresión del efecto túnel entre estos estados se debe a que el término de anisotropía  $C(S_+^4 + S_-^4)$  sólo conecta, de nuevo según la regla de la cadena (8), estados  $m$  y  $m'$  para los que  $|m - m'|$  sea múltiplo de 4. Curiosamente, este mismo argumento implica que el efecto túnel estaría “prohibido” para las resonancias  $H_n$  con  $n$  impar. Este problema admite, sin embargo, una solución relativamente sencilla si consideramos de nuevo el efecto de los campos magnéticos dipolares. Además del término diagonal, proporcional a  $S_z$  y que da lugar al “bias”  $\xi_{\text{dip}}$ , estas interacciones contienen también términos no diagonales, que contienen las componentes  $S_x$  y  $S_y$  del espín y que, por tanto, son equivalentes a campos magnéticos transversales  $H_{\text{dip},x}$  y  $H_{\text{dip},y}$ . Como se muestra en [49] y se ilustra en la Fig. 15, la introducción de estos términos rompe la regla de selección asociada al término de anisotropía y permite que el efecto túnel tenga lugar entre cualquier par de estados  $m$  y  $-m - n$ . En concreto, a campo aplicado nulo (pero tomando  $H_x = H_{\text{dip}}$ ) el estado  $\pm 3$  adquiere un  $\Delta_m/k_B \sim 10^{-2}$  K y puede, junto con el  $m = \pm 4$ , contribuir a la relajación magnética. El balance entre  $\Delta_m$  y  $\sigma_{\text{dip}}$  determina, en buena medida, el mecanismo de relajación (ver Fig. 15), da cuenta aproximada de la energía de activación observada experimentalmente y responde, por tanto, a la primera de las cuestiones planteadas al comienzo de este apartado.

#### 4.2. Interacción espín-fonón y decoherencia

El hecho de que  $\Delta_m$  de algunos estados excitados sea parecido o incluso mayor que  $\xi_{\text{dip}}$  da pie a pensar que la respuesta a la segunda de dichas cuestiones, relativa al grado de coherencia del efecto túnel, sea afirmativa. Al fin y al cabo, la frecuencia de túnel del doblete  $\pm 4$  es ya enorme  $\omega_{\text{tunel}}/2\pi \sim 3 \times 10^8$  Hz, correspondiente a un periodo de oscilación de  $\tau_{\text{tunel}} \sim 3,7 \times 10^{-9}$  s. Puesto que  $\tau_0 \gg \tau_{\text{tunel}}$ , el espín tiene tiempo de llevar a cabo unas 10 oscilaciones coherentes antes de decaer hacia el mínimo de energía.

Como se muestra a continuación, este argumento cualitativo resulta incorrecto, porque no tiene en cuenta la forma en la que se “prepara.” el estado inicial  $m$ , por activación térmica desde el fundamental. El cálculo detallado, que se describe a continuación, desvela la existencia de un mecanismo de decoherencia asociado al principio de conservación de la energía, y que limita la coherencia a escalas de tiempo  $\tau_\Phi$  mucho más cortas que el tiempo de vida  $\tau_0$  de los niveles excitados.

Para ello, es preciso tener en cuenta la interacción espín-fonón, responsable de llevar al sistema de espines hacia el equilibrio térmico a una temperatura  $T$  [52, 53, 54, 55, 56]. Por conveniencia, los autoestados de la energía del espín se denotan por  $|\psi_l\rangle$ , donde  $l$  es un

índice  $l = 1, \dots, 2S + 1$  que enumera a dichos estados en orden creciente de energía. Los estados del “baño” de fonones, que asumimos en equilibrio a temperatura  $T$ , se denotan por  $|\varepsilon_r\rangle$  y están definidos por el número de fonones excitados a cada frecuencia  $\omega_r \equiv \varepsilon_r/\hbar$ . El Hamiltoniano que describe al sistema acoplado “espín + fonones”<sup>es</sup>

$$\mathcal{H}_{\text{s-ph}} = \mathcal{H} + \mathcal{H}_{\text{ph}} + \mathcal{H}_{\text{int}} \quad (16)$$

donde el primer término es el Hamiltoniano del espín aislado, dado por la Ec. (12), el segundo es el Hamiltoniano del “baño” y el tercero describe la interacción entre ambos [52, 53, 55]. Para una molécula-imán aislada, los estados  $|\psi_l\rangle$  son estacionarios. Sin embargo, la interacción  $\mathcal{H}_{\text{int}}$  con los modos normales de la red cristalina crea una perturbación dependiente del tiempo que induce transiciones en el sistema de espín.

Con objeto de conocer el tiempo de decoherencia, interesa calcular la evolución temporal de uno de estos estados  $|\psi_i\rangle$  bajo la acción de la interacción espín-fonón. Para ello, es suficiente evaluar la matriz densidad  $\rho(t)$  del sistema acoplado, cuyos elementos de matriz valen

$$\langle \psi_l | \rho(t) | \psi_{l'} \rangle = \sum_{r,r'} P_r \langle \varepsilon_{r'} | \langle \psi_l | U(t) | \psi_i \rangle | \varepsilon_r \rangle \langle \varepsilon_r | \langle \psi_i | U^\dagger(t) | \psi_{l'} \rangle | \varepsilon_{r'} \rangle, \quad (17)$$

donde  $U(t)$  es el operador de evolución temporal para dicho sistema. En general, la matriz densidad definida por la Ec. (17) no es diagonal. Los elementos diagonales  $\langle \psi_l | \rho(t) | \psi_l \rangle$  dan las poblaciones de los niveles de energía, mientras que los elementos no diagonales indican la existencia de superposiciones entre estados de energía diferente que, como en el ejemplo sencillo del sistema de dos niveles (Fig. 7), pueden evolucionar con el tiempo de manera coherente.

Es posible escribir la evolución temporal del estado inicial  $|\psi_i\rangle |\varepsilon_r\rangle$  como sigue

$$U(t) |\psi_i\rangle |\varepsilon_r\rangle = \sum_{j,r''} b_{i,r''}^{j,r''}(t) \exp\left(\frac{-iE_{j,r''}^0}{\hbar}\right) |\psi_j\rangle |\varepsilon_{r''}\rangle, \quad (18)$$

donde  $E_{j,r''}^0 = E_j + \varepsilon_{r''}$  es la energía no perturbada y los coeficientes  $b_{i,r''}^{j,r''}(t)$  dependen del tiempo a causa de la interacción entre el espín y los fonones.

En lo que sigue, se considera el caso particular en que los estados  $|\psi_l\rangle$  tienen una “vida larga”. Se entiende por ello que el ensanchamiento homogéneo  $\hbar/\tau_0$  de los niveles sea mucho menor que la separación  $\Delta E_l = E_{l+1} - E_l$  entre cualquier pareja de niveles adyacentes, una condición válida para la mayor parte de espines en un cristal molecular [49, 96]. Es conveniente mencionar que existen modelos alternativos que se basan en la condición  $\hbar/\tau_0 \gg \Delta_m$  [97, 98, 99]. Estos modelos resultan apropiados para describir el efecto túnel en moléculas que se encuentran muy próximas a las condiciones de resonancia y son, por tanto, en cierto modo complementarios al modelo descrito aquí. El cumplimiento

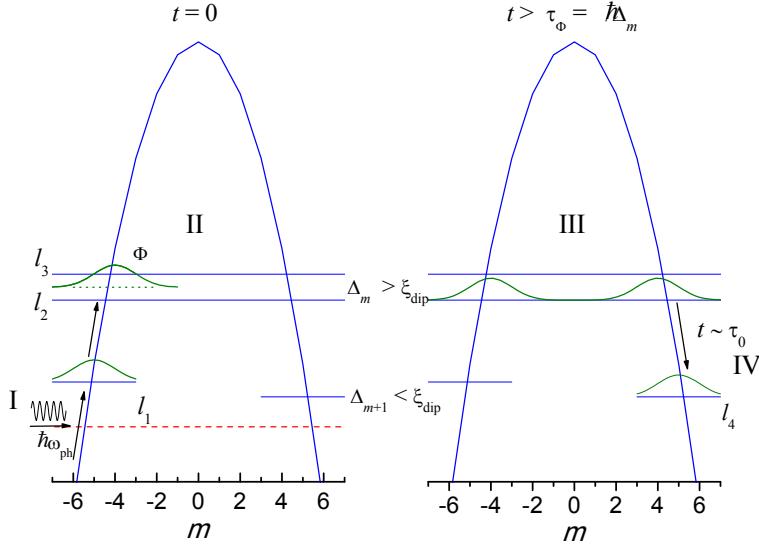


Figura 16.— Representación esquemática del efecto túnel vía niveles poblados térmicamente. Inicialmente (I), el espín ocupa el estado de energía  $|\psi_{l_1}\rangle$ . En el paso siguiente II, un fonón de energía  $\hbar\omega = E_{l_2} - E_{l_1}$  es absorbido y el sistema evoluciona hacia una función de ondas  $|\phi\rangle$ , localizada a la izquierda de la barrera de potencial y que es una superposición lineal de  $|\psi_{l_2}\rangle$  y  $|\psi_{l_3}\rangle$ . Tras el tiempo de decoherencia  $\tau_\Phi \simeq \hbar/\Delta_t$ , más corto incluso que el periodo de una oscilación de túnel coherente, el sistema evoluciona hacia la función de ondas simétrica  $|\psi_{l_2}\rangle$ . Tras el tiempo  $\tau_0 \gg \tau_\Phi$  (paso III), el sistema decae hacia un estado, de energía menor, localizado al lado opuesto de la barrera de potencial.

de la condición  $\hbar/\tau_0 \ll \Delta E_l$  garantiza que se puedan aplicar los métodos de la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo al cálculo de la matriz densidad. Los coeficientes  $b_{i,r}^{j,r''}(t)$  pueden expandirse en serie, dejando sólo términos lineales, como sigue

$$b_{i,r}^{j,r''}(t) \simeq \delta_{i,j} \delta_{r,r''} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \exp \left[ \frac{i(E_{j,r''}^0 - E_{i,r''}^0) t'}{\hbar} \right] \langle \varepsilon_{r''} | \langle \psi_j | \mathcal{H}_{int} | \psi_i \rangle | \varepsilon_r \rangle dt'. \quad (19)$$

Integrando la Ec. (19) y sustituyendo el resultado en (17) se llega al siguiente resultado

$$\langle \psi_l | \rho(t) | \psi_{l'} \rangle \simeq \sum_{r,r'} P_r \langle \varepsilon_{r'} | \langle \psi_l | \mathcal{H}_{int} | \psi_i \rangle | \varepsilon_r \rangle \langle \varepsilon_r | \langle \psi_i | \mathcal{H}_{int} | l' \rangle | \varepsilon_{r'} \rangle \quad (20)$$

$$\times \exp \left[ \frac{-i(E_l - E_{l'}) t}{\hbar} \right] \frac{\exp \left[ \frac{i(E_{l',r'}^0 - E_{i,r}^0) t}{\hbar} \right] - 1}{E_{l',r'}^0 - E_{i,r}^0} \frac{\exp \left[ \frac{-i(E_{l',r'}^0 - E_{i,r}^0) t}{\hbar} \right] - 1}{E_{l',r'}^0 - E_{i,r}^0} \quad (21)$$

Los términos que dan la contribución dominante a (21) son resonantes, es decir, aquéllos que cumplen  $E_{j,r'}^0 - E_{i,r}^0 \simeq 0$  con  $j = l$  ó  $l'$ . Como consecuencia, los elementos diagonales de  $\rho(t)$  crecen con  $t$  mientras que los elementos no diagonales dejan de

crecer cuando  $t \approx \hbar / (E_l - E_{l'})$ . Para tiempos aún más largos, la matriz densidad  $\rho$  se vuelve aproximadamente diagonal.

La situación que resulta de estos cálculos se ilustra en la Fig. 16, donde se considera el efecto túnel por un doblete ( $l_2, l_3$ ) separado aproximadamente por el desdoblamiento por efecto túnel  $\Delta_m$ . Este doblete puede corresponder, por ejemplo, a  $m \pm 2$  del  $Mn_{12}$ , cuyas funciones de onda se muestran en la Fig. 15. La supresión de los elementos no diagonales  $\langle \psi_{l_2} | \rho(t) | \psi_{l_3} \rangle$  implica que la oscilación coherente del espín se destruye también en tiempos mayores que

$$\tau_\Phi \approx \hbar / \Delta_m, \quad (22)$$

es decir, aproximadamente tras una oscilación y mucho antes de que el estado decaiga hacia un estado de menor energía emitiendo un fonón.

El origen de este eficiente mecanismo de decoherencia puede encontrarse en el principio de conservación de la energía. Así, la oscilación coherente del espín precisa de la preparación inicial del sistema en una superposición de  $|\psi_{l_2}\rangle$  y  $|\psi_{l_3}\rangle$ , por ejemplo,  $|\psi_{l_2}\rangle + |\psi_{l_3}\rangle$ . Ahora bien, este estado inicial resulta de la transición, inducida por un fonón de energía bien definida  $\hbar\omega_{ph}$ , desde un estado de menor energía  $|\psi_{l_1}\rangle$ . El hecho de que los niveles  $l_2$  y  $l_3$  tengan energías diferentes hace que la transición  $|\psi_{l_1}\rangle \rightarrow |\psi_{l_2}\rangle + |\psi_{l_3}\rangle$  viole necesariamente la conservación de la energía por una cantidad aproximadamente igual a  $\Delta_m$ . Un estado superposición semejante puede, por este motivo, “vivir” tan sólo durante tiempos no mayores que  $\hbar / \Delta_m$ , permitidos por el principio de incertidumbre de la energía. A tiempos mayores, la conservación de la energía se impone y el sistema evoluciona hacia un autoestado de  $\mathcal{H}$ .

A tiempos largos comparados con  $\tau_\Phi$ , el espín simplemente realiza transiciones incoherentes entre diferentes autoestados de la energía. El mecanismo de relajación es simplemente un proceso de Orbach [54], activado térmicamente. El efecto túnel interviene a través de la forma, o más correctamente, el solapamiento de las funciones de onda. Para estados lejos del tope de la barrera clásica, por tanto localizados, los fonones permiten aumentar o disminuir la componente  $m$  en una unidad. Sin embargo, los estados superposición presentan una apreciable amplitud de probabilidad  $\langle m | \psi_l \rangle$  a ambos lados de la barrera de energía y contribuyen, como se ilustra en la Fig. 16, a “conectar” los dos pozos de potencial.

#### 4.3. Ecuación maestra: cálculo del tiempo de relajación

En la sección anterior se ha mostrado que la matriz densidad es aproximadamente diagonal. Para calcular la relajación de las poblaciones  $P_l$  de los niveles de espín hacia sus valores de equilibrio térmico podemos, por tanto, usar una sencilla ecuación maestra

$$\frac{dP_l}{dt} = \sum_{l'} (w_{l \leftarrow l'} P_{l'} - w_{l' \leftarrow l} P_l), \quad (23)$$

que incluye probabilidades de transición  $w_{l \leftarrow l'}$  inducidas por fonones. Estas probabilidades pueden calcularse mediante la regla de oro de Fermi [100], usando el Hamiltoniano de interacción  $\mathcal{H}_{\text{int}}$  siguiente

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = D \{ (\epsilon_{xz} + \omega_{xz}) \otimes [S_x S_z + S_z S_x] + (\epsilon_{yz} + \omega_{yz}) \otimes [S_y S_z + S_z S_y] \}, \quad (24)$$

que refleja el efecto de tensiones  $\epsilon_{i,z}$  y rotaciones  $\omega_{i,z}$  sobre la anisotropía uniaxial  $-DS_z^2$  [55, 97, 99]. Usando este Hamiltoniano, se llega a la expresión siguiente para las probabilidades de transición

$$w_{l' \leftarrow l} = q |E_l - E_{l'}|^3 (|\langle l' | S_x S_z + S_z S_x | l \rangle|^2 + |\langle l' | S_y S_z + S_z S_y | l \rangle|^2) A_{l,l'}, \quad (25)$$

donde  $A_{l,l'} = n_{l,l'} (A_{l,l'} = 1 + n_{l,l'})$  para transiciones que supongan un aumento (disminución) de energía,  $n_{l,l'}$  es la población de fonones con energía  $\Delta_{l',l} = E_{l'} - E_l \geq 0$  y  $q$  es una constante que depende de las constantes elásticas de la red. Este parámetro está dado por la expresión siguiente [99]

$$q \equiv \frac{D^2}{6\pi\rho_m c_s^5 \hbar^4}. \quad (26)$$

donde  $\rho_m$  es la densidad del material molecular y  $c_s$  es la velocidad del sonido asociada a modos de vibración acústicos transversales. Este parámetro  $q$  determina la magnitud de todas las probabilidades de transición. Es posible, por tanto, determinarlo ajustando el tiempo de relajación medido a unos ciertos valores de temperatura y campo magnético, y usarlo para determinar los tiempos de relajación en cualquier otra condición. También es posible estimar  $q$  directamente usando el valor conocido de  $D$  y estimando  $c_s$ , a partir de experimentos de calor específico. En efecto, la velocidad del sonido puede relacionarse con la temperatura de Debye  $\Theta_D$ , característica del material, mediante la expresión que sigue [101]:

$$c_s = \frac{k_B \Theta_D}{\hbar} \left( \frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{-\frac{1}{3}} \quad (27)$$

donde  $N$  es el número de moléculas por celda unidad cuyo volumen es  $V$ . En el caso de Mn<sub>12</sub> y Fe<sub>8</sub>, ambos métodos dan lugar a valores de  $q$  que son compatibles entre sí, dentro de los márgenes establecidos por las incertidumbres de los parámetros  $\Theta_D$  y  $c_s$  [96].

La ecuación maestra puede resolverse numéricamente para determinar  $\tau$  y otras magnitudes dependientes del tiempo [49, 102, 103]. La Fig. 17 muestra la dependencia de  $\tau$  con  $H_z$  para el Mn<sub>12</sub>Ac, a  $T = 5$  K. El efecto túnel resonante entre  $+m$  y  $-m - n$  o, de

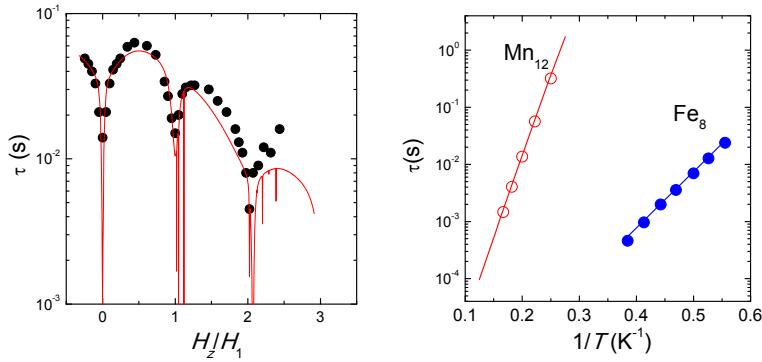


Figura 17.— Izquierda: Tiempo de relajación de un monocrystal de  $Mn_{12}Ac$ , medido a 5 K en función del campo  $H_z$ , comparado con resultados obtenidos resolviendo numéricamente la ecuación maestra (23). Derecha: Tiempo de relajación de  $Mn_{12}ac$  y  $Fe_8$ , medido a campo nulo en función de la temperatura, comparado con los resultados calculados mediante la ecuación maestra (23).

forma más precisa, la existencia de estados deslocalizados cercanos al tope de la barrera de potencial, da lugar a mínimos Lorentzianos cerca de cada campo de cruce  $H_{n,m}$ . La anchura  $\Delta H_{z,n,m}$  de cada máximo está determinada por el desdoblamiento por efecto túnel  $\Delta_m$  del doblete correspondiente:  $\Delta H_{z,n,m} \simeq \Delta_m/(2m + n)g\mu_B$ . A campo nulo, la curva está aproximadamente formada por la superposición de dos mínimos. El más estrecho de ambos ( $\Delta H_z = 23$  Oe) corresponde al doblete  $m = \pm 4$ , cuyo  $\Delta_4/k_B \simeq 2 \times 10^{-2}$  K, mientras que el más ancho ( $\Delta H_z = 1,4$  kOe) corresponde al doblete  $m = \pm 2$ , con  $\Delta_2 \simeq 0,5$  K. Para resonancias con  $n \geq 1$ , los mínimos muestran “satélites” debidos a resonancias de diferentes estados  $+m$  y  $-m - n$ . Las resonancias asociadas con niveles profundos, para los que  $\Delta_m \ll \sigma_{\text{dip}}$ , se suprimen al considerar la distribución de campos dipolares y no tienen, por tanto, significado experimental en un cristal molecular real.

Teniendo en mente estas consideraciones, los cálculos reproducen correctamente la curva de  $\tau(H_z)$  medida experimentalmente. El modelo predice también el aumento exponencial de  $\tau$  con la disminución de la temperatura y da cuenta de la energía de activación  $U$  observada experimentalmente, tanto en el caso de  $Mn_{12}Ac$  como en el de  $Fe_8$ . Es, por tanto, posible concluir que la teoría expuesta da cuenta, de manera satisfactoria, del efecto túnel resonante por efectos excitados. Como se describe en la sección siguiente, una situación marcadamente diferente aparece al considerar el efecto túnel por el estado fundamental.

## 5. El régimen cuántico: efecto túnel por el estado fundamental

### 5.1. Experimentos de Landau-Zener y de relajación magnética

A muy bajas temperaturas, la población térmica de los estados excitados y, en particular, de aquéllos que contribuyen al camino de relajación por efecto túnel decae ex-

ponencialmente, lo que conduce a que el tiempo  $\tau$  asociado a este proceso se vuelva astronómicamente largo. Cuando  $k_B T \ll \Omega_0$  ( $\simeq 14$  K para  $Mn_{12}$ ), cada molécula-imán se comporta como un sistema de dos niveles, semejante al descrito en la sección 2.3 (ver Fig. 18). Resulta, por tanto, natural preguntarse sobre la posibilidad de que, bajo estas condiciones, pueda tener lugar un proceso de efecto túnel de espín entre los estados  $+S$  (ó  $|\uparrow\rangle$ ) y  $-S$  (ó  $|\downarrow\rangle$ ).

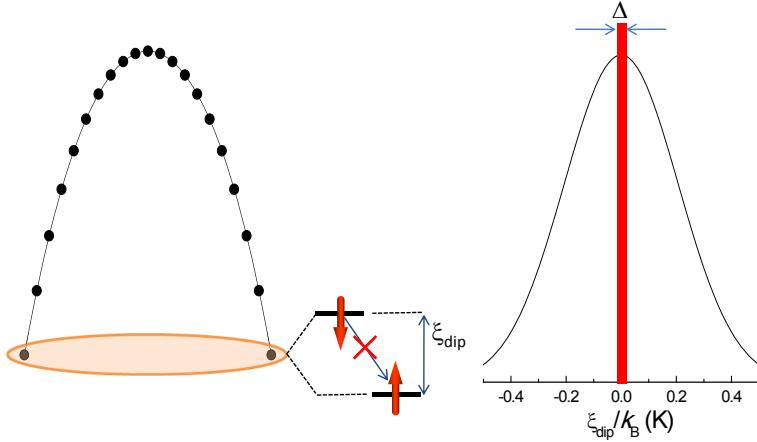


Figura 18.— Izquierda: a temperaturas suficientemente bajas, la población de estados excitados se hace despreciable. En esas condiciones, una molécula-imán se comporta como un sistema de dos niveles. El efecto túnel del espín se encuentra bloqueado por el desdoblamiento  $\xi_{\text{dip}}$  generado por las interacciones dipolares. Derecha: distribución Gaussiana de  $\xi_{\text{dip}}$  característica de un cristal de un material paramagnético. En cada instante de tiempo, sólo la minúscula fracción de espines con  $|\xi| < \Delta$  pueden invertirse por efecto túnel.

La acción de los campos dipolares e hiperfinos bloquea de manera muy eficiente el efecto túnel coherente [51]. Baste recordar, para ello, que  $\Delta_S/k_B$  se estima en  $10^{-11}$  K para el  $Mn_{12}$  y  $10^{-7} - 10^{-8}$  K para el  $Fe_8$ . La manera más sencilla de inducir una cierta probabilidad de efecto túnel es realizando experimentos de “Landau-Zener”, en los que el campo magnético  $H_z$  se barre a través del campo de cruce  $H_{n,S}$  entre el estado fundamental y otros estados  $-S - n$ , con  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Experimentos de este tipo se han llevado a cabo sobre un buen número de moléculas-imán [50, 104, 105, 177, 107, 108, 109, 110]. En el caso del  $Fe_8$  [104, 111, 112], la imanación muestra “saltos” incluso en torno a  $H_z = 0$ . Aplicando la expresión (11) estos experimentos han permitido estimar el desdoblamiento  $\Delta_S$ , que coincide con los valores dados arriba. Experimentos en presencia de campos magnéticos transversales revelan asimismo la existencia de fascinantes fenómenos de interferencia entre diferentes trayectorias de espín, que pueden llegar a producir una supresión casi completa de  $\Delta_S$  [104]. En el caso de  $Mn_{12}Ac$ , la probabilidad de inversión es demasiado baja para dar lugar a cambios perceptibles en la imanación. Tan sólo se ha podido observar el efecto túnel entre el estado  $+S$  y estados excitados al otro lado de la barrera

de potencial [105, 177, 107, 108, 109]. Los valores de  $\Delta_m$  observados están de acuerdo con los calculados a partir del Hamiltoniano de espín, aunque parecen indicar la existencia de una distribución de parámetros de anisotropía que ha sido asociada con defectos de la red cristalina [113, 114] o desorden en las posiciones de moléculas intersticiales [115].

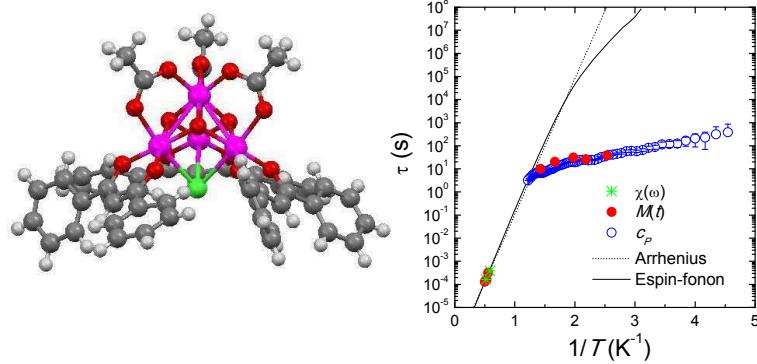


Figura 19.— Izquierda: Estructura molecular del cluster de Mn<sub>4</sub>Cl. Los átomos de Mn se representan en rosa, los de C en gris, los de Cl en verde y los de H en blanco. Derecha: Tiempo de relajación magnética determinado mediante experimentos de susceptibilidad ac y de relajación magética [116]. Se muestra también el tiempo de relajación espín-red estimado a partir de experimentos de calor específico [117]. Estos datos experimentales se comparan con la predicción del modelo descrito en la sección 4.

Cabe preguntarse sobre la probabilidad de que los espines de moléculas-imán se inviertan por efecto túnel en experimentos convencionales de relajación magnética realizados bajo un campo magnético independiente del tiempo. El procedimiento habitual consiste en saturar magnéticamente la muestra en un campo magnético intenso y después reducir la intensidad de campo bien a  $H = 0$  o bien a valores ligeramente negativos, observando el decaimiento de la imanación  $M$  hacia su nuevo estado estacionario  $M_{\text{eq}}$ . El tiempo de relajación  $\tau$  se puede entonces determinar ajustando dicha evolución a una función exponencial del tiempo

$$M(t) = M(t = 0) + [M_{\text{eq}} - M(t = 0)] \left[ 1 - \exp \left( -\frac{t}{\tau} \right) \right] \quad (28)$$

donde  $M(t = 0)$  es la imanación inicial. Experimentos de este tipo se han llevado a cabo sobre Mn<sub>12</sub>Ac [118, 119], Fe<sub>8</sub> [111, 112, 120] y otros materiales moleculares [116]. La relajación observada no es, en general, puramente exponencial sino más bien responde a leyes fenomenológicas de tipo potencial  $((t/\tau)^p)$  o exponencial estirada en el tiempo  $(\exp[-(t/\tau)^\beta])$ . Un ajuste a la Ec.(28) permite, en cualquier caso, obtener un tiempo  $\tau$  promedio. La Fig. 19 muestra, como ejemplo, el tiempo de relajación determinado por Aubin y colaboradores [116] sobre una muestra de clusters de Mn<sub>4</sub>Cl, cuyo espín molecular  $S = 9/2$ . A medida que la temperatura desciende, se observa un cambio desde

un proceso activado térmicamente, similar al descrito en las dos secciones anteriores, a otro que depende más débilmente de  $T$ . En estas condiciones, el tiempo de relajación muestra también un mínimo en torno a  $H = 0$ , similar al observado en experimentos de efecto túnel por estados excitados. Por debajo de  $T_Q \simeq 1$  K ( $T_Q \simeq 0,8$  y  $0,4$  K en el caso de  $\text{Mn}_{12}$  y  $\text{Fe}_8$ , respectivamente), la inversión de la imanación tiene lugar, por tanto, directamente por efecto túnel entre los dos estados del doblete fundamental. A este nuevo, en parte inesperado, régimen de relajación se le suele denominar régimen cuántico.

### 5.2. *Modelo de Prokofév y Stamp*

La observación de efecto túnel directo resulta sorprendente incluso en clusters formados por unos pocos átomos magnéticos. Para que exista una cierta probabilidad de efecto túnel, es preciso compensar el bias dipolar  $\xi_{\text{dip}}$  mediante la cesión o adquisición de energía al entorno de la molécula. Una posibilidad, dentro del esquema teórico descrito en la sección 4, es que la energía se intercambie con los fonones de la red [52, 53]. La probabilidad de este proceso directo mediado por fonones viene dada por

$$\tau_{\text{dir}}^{-1} = w_{1 \leftarrow 2} + w_{2 \leftarrow 1} = \tau_{\text{dir}, T \rightarrow 0}^{-1} \coth \left( \frac{E_2 - E_1}{k_B T} \right) \quad (29)$$

donde  $w_{1 \leftarrow 2}$  y  $w_{2 \leftarrow 1}$  son probabilidades de emisión y absorción de un fonón de frecuencia  $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$ , derivadas de la Ec.(25). El límite  $\tau_{\text{dir}, T \rightarrow 0}$  corresponde a la emisión espontánea de un fonón, un proceso que es posible incluso en el cero absoluto. Es, sin embargo, un proceso muy poco probable. La Fig. 19 muestra datos de  $\tau$  vs  $T$  calculados para el  $\text{Mn}_4\text{Cl}$ , considerando la probabilidad de efecto túnel inducido por fonones. Dichos cálculos predicen que  $\tau_{\text{dir}, T \rightarrow 0} > 10^8$  s (es decir, más de tres aos), mientras que los experimentos muestran relajaciones con escalas de tiempo en la región entre 100 y 1000 s. Además de esta enorme discrepancia cuantitativa, existe también una importante diferencia de orden cualitativo. El proceso directo es no resonante, es decir, el tiempo  $\tau_{\text{dir}}$  dado por la Ec. (29) es máximo a campo nulo, y no mínimo como se observa experimentalmente, debido a que la densidad de fonones se anula en  $\omega \rightarrow 0$  [49, 121].

Una solución a este dilema fue propuesta, en 1998, por Prokof'ev y Stamp [121], que consideraron la posibilidad de que los espines intercambien energía con un “baño” de espines nucleares. La idea básica de este modelo se muestra, de manera esquemática, en la Fig. 20. El “bias” hiperfino no es constante en el tiempo. Incluso a muy bajas temperaturas, cuando la relajación espín-fonón de los espines nucleares se hace enormemente lenta (más, de hecho, que la propia relajación de los espines electrónicos), persisten procesos de difusión de espín. Sucesos de “flip-flop” (ver Fig. 20) intercambian la orientación de dos o más espines nucleares, manteniendo su energía aproximadamente constante. Estos procesos pueden tener lugar entre espines nucleares de la misma molécula, o bien entre

espines localizados en moléculas distintas. Como resultado, el bias neto  $\xi = \xi_{\text{hf}} + \xi_{\text{dip}}$  que “veçada una de las moléculas fluctúa en el tiempo, con una amplitud  $\delta\xi_{\text{hf},0}$  que es del orden de las escalas de energía hiperfinas.

Esta fluctuación puede, de manera similar a lo que ocurre en un experimento de Landau-Zener, llevar a que moléculas cuyo  $\xi_{\text{dip}} < \delta\xi_{\text{hf},0}$  cumplan ocasionalmente las condiciones de resonancia  $\xi \lesssim \Delta$ . Puesto que típicamente  $\delta\xi_{\text{hf},0} \gg \Delta_m$ , los espines nucleares amplian la “ventana.energética para el efecto túnel, dando la oportunidad de invertirse a un número de espines que, en caso contrario, estarían completamente bloqueados por los campos dipolares (ver la Fig. 20).

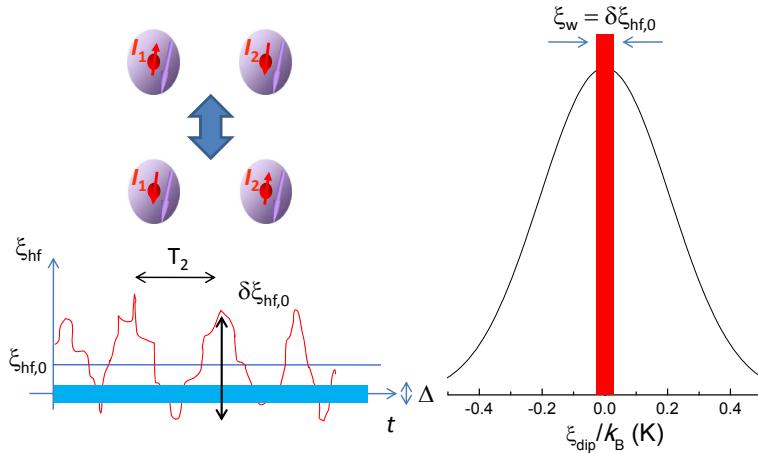


Figura 20.— Imagen sencilla del modelo de Prokof'ev y Stamp para el efecto túnel incoherente por el estado fundamental. Fluctuaciones de tipo espín-flop en el sistema de espines nucleares dan lugar a una variación con el tiempo de la energía hiperfina  $\xi_{\text{hf}}$  de cada molécula. A la derecha se muestra la distribución  $P$  de energías  $\xi_{\text{dip}}$  asociadas a las interacciones dipolares. Se indica la “ventana.energética para el efecto túnel, abierta por las interacciones hiperfinas.

La probabilidad de que un espín se invierta por este mecanismo efecto túnel  $P_{\text{PS}}$  puede calcularse directamente usando las expresiones (10) y (11) de Landau y Zener, pero tomando  $v_\xi \simeq \delta_{\text{hf},0}/T_2$ , donde  $T_2$  es el tiempo característico de los procesos de difusión de espín. La probabilidad por unidad de tiempo,  $\tau_{\text{PS}}^{-1}$ , se obtiene entonces multiplicando esta probabilidad por el número promedio  $T_2^{-1}$  de cruzamientos entre niveles que tienen lugar por unidad de tiempo, dando finalmente la expresión siguiente

$$\tau_{\text{PS}}^{-1} \simeq \frac{\Delta_S^2}{\hbar\xi_w} \quad (30)$$

que, como hecho curioso, no depende del valor de  $T_2$ .

Cabe preguntarse ahora qué sucede con aquellos espines, todavía la mayoría en muchas situaciones experimentales, sometidos a un “bias” dipolar  $\xi_{\text{dip}} > \xi_w$  (ver Fig. 20). Curiosamente, en su auxilio acuden entonces las propias interacciones dipolares. Cada vez que un

espín de los situados dentro de la ventana (es decir, con  $\xi_{\text{dip}} \lesssim \xi_w$ ) se invierte, por efecto túnel, la distribución local de los campos magnéticos dipolares cambia en toda la muestra. Así, espines con un valor grande de  $\xi_{\text{dip}}$  pueden adquirir una probabilidad de invertirse, mientras que otros son “expulsados” de la ventana. Es posible demostrar [121, 122, 123] que este proceso continúa en el tiempo, dando la posibilidad a *todos* los espines de la red cristalina a invertirse por efecto túnel. Debido a la existencia de una distribución en  $\xi_{\text{dip}}$ , la relajación magnética no es exponencial, sino más bien adquiere una forma potencial en el tiempo, en buen acuerdo con los resultados experimentales. La ley que rige la evolución temporal de la imanación depende, sin embargo, de las condiciones iniciales y del tipo de red cristalina. Por ejemplo, la imanación de muestras inicialmente saturadas magnéticamente decae proporcionalmente a la raíz cuadrada del tiempo  $M_s - M(t) \propto t^{1/2}$  [121]. Esta ley no es, sin embargo, universal. La respuesta de una muestra inicialmente desimanada a un campo  $H$  (un experimento semejante a la medida de la susceptibilidad dc) también sigue una ley potencial  $M \propto t^p$  pero el exponente  $p$  varía entre 0,3 y 0,8 dependiendo de la simetría de la red de dipolos magnéticos [124].

El efecto de la distribución  $P(\xi_{\text{dip}})$  se puede tener en cuenta, de manera fenomenológica, promediando la Ec. (30) sobre la distribución. Tomando, para ello,  $\tau_{PS} = 0$  para espines fuera de la ventana y considerando la presencia de un campo magnético aplicado  $H$  que induce un desdoblamiento Zeeman  $\xi_Z = 2g\mu_B H S$ , conduce a la expresión siguiente

$$\tau_{PS}^{-1} \simeq \int_{-\xi_Z - \xi_w/2}^{-\xi_Z + \xi_w/2} \frac{\Delta_S^2}{\hbar \xi_w} P(\xi_{\text{dip}}) d\xi_{\text{dip}}. \quad (31)$$

Esta expresión puede simplificarse en el caso, bastante habitual, en que  $\sigma_{\text{dip}} \gg \xi_w$ , cuando la función  $P(\xi_{\text{dip}})$  se puede considerar como una constante dentro del integrando. Se llega entonces a la expresión siguiente

$$\tau_{PS}^{-1} \simeq \frac{\Delta_S^2}{\hbar} P(\xi_{\text{dip}} = -\xi_Z). \quad (32)$$

La ecuación aproximada (32) da cuenta, al menos de manera cualitativa, de un buen número de observaciones experimentales. Así,  $\tau_{PS}$  es independiente de la temperatura y presenta un mínimo en condiciones de resonancia, es decir, cuando  $\xi_Z = 0$ . Por otra parte, esta expresión ha permitido obtener experimentalmente la distribución de campos dipolares  $P(\xi_{\text{dip}})$ , a partir del análisis de curvas de relajación magnética medidas a distintos campos magnéticos [112]. Sin embargo, a pesar de su éxito este modelo deja abiertas algunas cuestiones de importante calado, una de las cuales se discute en la sección siguiente.

### 5.3. Efecto túnel y relajación hacia el equilibrio térmico

Las ecuaciones fundamentales del magnetismo, incluyendo la ley de Curie, se basan en la capacidad de que los momentos magnéticos alcancen el estado de equilibrio con la

red cristalina, que actúa como baño térmico. Resulta, por este motivo, curioso que los mecanismos de relajación espín red de espines muy anisótropos, como los de moléculas-imán o iones lantánidos, planteen todavía un buen número de cuestiones. A temperaturas no demasiado bajas (es decir, cuando  $k_B T$  no es  $\ll \Omega_0$ ), la relajación de estos espines puede tener lugar por medio de procesos activados térmicamente, como el que se describe en los apartados 3 y 4, dedicados al  $Mn_{12}$ . El régimen cuántico de relajación, que aparece cuando la temperatura se aproxima al cero absoluto, constituye, por el contrario, una situación especialmente intrigante.

A campo nulo, los espines sólo pueden invertirse por efecto túnel. El modelo descrito en la sección precedente da cuenta de experimentos que miden la relajación de la imanación [112, 120]. Sin embargo, los procesos de efecto túnel modifican la imanación de la muestra pero conservan la energía del sistema de espines, si incluimos en éste tanto los espines electrónicos como los nucleares. Esta situación se muestra, de manera esquemática, en la Fig. 21. Dentro de este marco teórico, resulta natural esperar [122] que las relajaciones de la imanación y de la energía estén determinadas por procesos diferentes, y que los estados de equilibrio se alcancen en escalas de tiempo mucho más largas que los tiempos característicos de efecto túnel, dados por la Ec. (32) .

Sorprendentemente, unos cuantos resultados experimentales apuntan a lo contrario. Así, algunos experimentos de calor específico indican que moléculas-imán como  $Mn_4Cl$  y  $Fe_8$  alcanzan el equilibrio en escalas de tiempo similares a las observadas en experimentos de relajación magnética [117, 141]. La Fig. 19 muestra el caso de la molécula de  $Mn_4$ . El tiempo de relajación espín-red estimado, de manera aproximada, a partir de experimentos de calor específico [117] presenta un acuerdo excelente con el tiempo de relajación magnética determinado por Aubin y colaboradores [116], incluso a muy bajas temperaturas. Por otro lado, experimentos de resonancia magnética nuclear muestran que la temperatura efectiva del “baño” de espines nucleares se mantiene muy próxima a la de la red hasta la vecindad del cero absoluto [94, 95].

Para tratar de dilucidar la naturaleza del mecanismo de relajación espín-red, es claramente deseable disponer de medidas directas del tiempo de relajación espín-red en función de parámetros como la temperatura, el campo magnético, e incluso la concentración de espines, es decir, la intensidad de las interacciones dipolares. Es ésta una tarea experimental ardua, ya que los tiempos de efecto túnel son, en el caso de moléculas-imán, muy largos comparados con la ventana de tiempo accesible a las técnicas experimentales que, como la susceptibilidad ac, permiten medir dichos tiempos de relajación. Para tratar de evitar esta dificultad, es preciso estudiar moléculas más simples, que contengan un único átomo magnético. La Fig. 21 muestra un ejemplo característico de moléculas de este tipo, en concreto el polioxometalato  $Na_9[Er(W_5O_{18})_2]\cdot yH_2O$ , que denominamos simplemente  $ErW_{10}$  [126]. Está formado por un único ion de  $Er^{3+}$  encapsulado entre dos

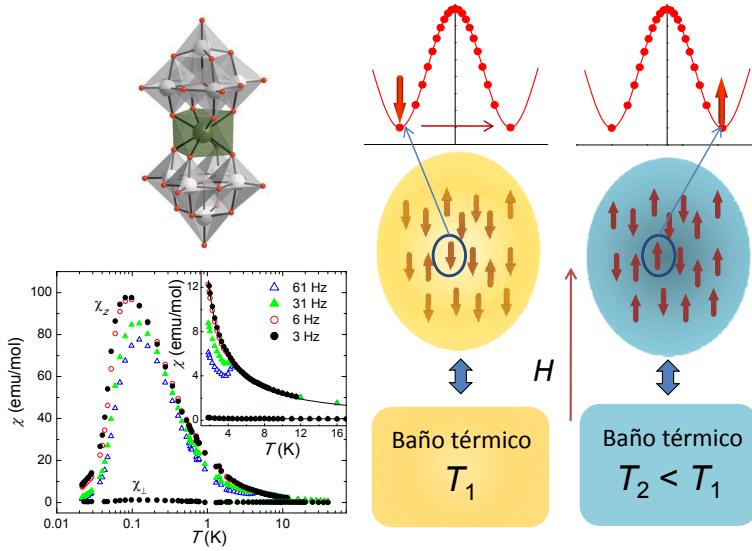


Figura 21.— Izquierda: Susceptibilidad magnética ac de un cluster de ErW<sub>10</sub>. Para frecuencias  $\omega < 6$  Hz la susceptibilidad sigue la ley de Curie-Weiss, lo que indica la existencia de un eficiente mecanismo de relajación espín-red. Derecha: A muy baja temperatura, sólo aquellos espines que se encuentran muy cerca de resonancia pueden invertirse, por efecto túnel. A pesar de ello, estos procesos son capaces de mediar la necesaria transferencia de energía hacia el baño térmico. Cómo tiene lugar esta relajación es, por ahora, una incógnita.

clusters de polioxometalato. La estructura molecular confiere una fuerte anisotropía al momento angular  $J = 15/2$  de la tierra rara, que da lugar a un doblete fundamental asociado a las proyecciones  $m_J = \pm 13/2$ . El ErW<sub>10</sub> muestra, a temperaturas próximas a la del Helio líquido, el comportamiento típico de una molécula-imán, es decir, el bloqueo superparamagnético de la susceptibilidad (ver Fig. 21) y la histéresis magnética.

Por debajo de 4 K, la población de niveles magnéticos excitados se hace menor que 1 en 10<sup>4</sup>. En estas condiciones, el ErW<sub>10</sub> se comporta como un sistema de dos niveles pero, como se muestra a continuación, con tiempos de túnel bastante cortos, ofreciendo entonces una situación ideal para investigar la relajación espín-red en el régimen cuántico. Los experimentos se realizaron usando un microsusceptómetro SQUID, desarrollado en Zaragoza [127], que permite la medida de la susceptibilidad ac hasta muy bajas temperaturas (13 mK) y en una enorme región de frecuencias que abarca desde 10<sup>-2</sup> Hz hasta 10<sup>6</sup> Hz. Estos experimentos, que exploran los mecanismos de relajación espín-red a campo nulo, pueden considerarse complementarios a los experimentos clásicos en este campo [56], llevados a cabo en su mayor parte mediante técnicas de resonancia paramagnética electrónica y que exploran la relajación en presencia de campos magnéticos moderadamente elevados.

La Fig. 22 muestra el tiempo de relajación espín-red  $\tau$  de una muestra pura de ErW<sub>10</sub> así como de muestras diluidas magnéticamente mediante la sustitución de iones Er<sup>3+</sup> por otros no magnéticos de Y<sup>3+</sup> [128]. Los resultados muestran varios aspectos comunes

a los observados en experimentos de relajación magnética realizados sobre moléculas-imán. En primer lugar, se observa un cambio entre una relajación activada térmicamente, dominante a alta  $T$ , a un mecanismo que depende muy débilmente de  $T$ . Por otra parte, el mecanismo de relajación que domina en la región de muy bajas temperaturas ( $T \lesssim 2 - 3$  K, dependiendo de la concentración) es resonante, es decir,  $\tau$  presenta un mínimo muy agudo en torno a  $H = 0$ . Es, también, sorprendentemente eficiente: el tiempo medido experimentalmente  $\tau \simeq 10^{-3}$  s resulta ser 10 órdenes de magnitud que el tiempo de relajación predicho para los procesos de emisión espontánea de fonones.

Todas estas observaciones admiten una explicación en el marco del modelo de efecto túnel inducido por las interacciones hiperfinas, descrito en la sección 20. De hecho, insertando en la Ec. (32) los parámetros  $\sigma_{\text{dip}}/k_B \simeq 0,08$  K y  $\Delta_S/k_B \sim 8 \times 10^{-5}$  K, obtenidos de experimentos independientes, da  $\tau_{\text{PS}} \simeq 3 \times 10^{-4}$  s, es decir, del mismo orden de magnitud que el tiempo de relajación espín-red observado experimentalmente. El modelo explica, incluso, la disminución observada en  $\tau$  con el aumento de la concentración  $x$  de iones magnéticos. Siendo el  $\text{Er}^{3+}$  un ión de Kramers, en ausencia de un campo magnético aplicado el desdoblamiento por efecto túnel  $\Delta_S$  ha de ser causado por los campos magnéticos dipolares. Haciendo  $\Delta_S$ , y lógicamente también  $\sigma_{\text{dip}} \propto x$  en la Ec. (32), da como resultado  $\tau_{\text{PS}} \propto x$ , en acuerdo cualitativo con los experimentos.

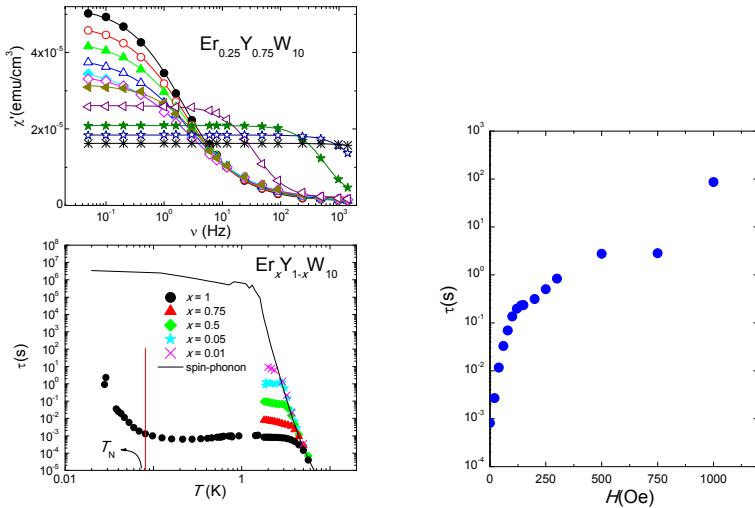


Figura 22.— Izquierda: Curvas de susceptibilidad ac de  $\text{Er}_{0,25}\text{Y}_{0,75}\text{W}_{10}$  medidas a  $T =$  (de arriba hacia abajo) 1,8 K, 2 K, 2,22 K, 2,5 K, 2,86 K, 3,09 K, 3,33 K, 4 K, 5 K, 5,7 K y 6,5 K. El panel inferior el tiempo de relajación espín-red. La línea sólida muestra la predicción de la teoría de relajación mediada por fonones (ver [52, 53, 54] y la sección 4). La línea vertical marca la temperatura de ordenamiento antiferromagnético  $T_N = 81$  mK de  $\text{ErW}_{10}$ . Derecha: Tiempo de relajación espín-red de  $\text{ErW}_{10}$  medido a  $T = 2$  K en función del campo magnético  $H_z$ .

Podemos concluir, por tanto, que la relajación espín-red en el régimen cuántico tiene lugar mediante procesos de efecto túnel, probablemente mediados por las interacciones

hiperfinas. Pero, cómo tiene lugar entonces el intercambio de energía con las vibraciones de la red, necesario para que los espines tengan noticia de la temperatura real? Recientemente, se han propuesto diversas soluciones a este dilema, incluyendo la posibilidad de que parte de la energía sea transferida a rotaciones locales de la molécula [117], o bien al baile de fonones a través de la modulación de los campos dipolares [94], de manera similar a como predice el modelo de Waller de la interacción espín-red [56, 129], o incluso la existencia de emisión coherente, conocida como superradiancia [130], de un fonón por parte de muchos espines [128]. Sin embargo, ninguna de estas explicaciones ha podido dar cuenta, de manera satisfactoria, de los datos experimentales. Los experimentos dejan al descubierto, por tanto, la existencia de una importante laguna teórica en un aspecto fundamental, que está en la base de numerosas ecuaciones del magnetismo, incluyendo la decana de todas ellas: la ley de Curie.

## 6. Gatos de Schrödinger magnéticos

A campo nulo, la energía potencial clásica de un espín molecular tiene la forma de un potencial de doble pozo simétrico. En estas condiciones, los autoestados  $|\psi_l\rangle$  son superposiciones simétricas o antisimétricas de los estados  $|m\rangle$ . Esta situación constituye el equivalente magnético de la molécula de  $\text{NH}_3$  [5] o del desafortunado “gato de Schrödinger” [2]. Sin embargo, observar de manera directa la existencia de estas superposiciones cuántica resulta, a priori, una tarea casi imposible. La interacción de una molécula-imán con su entorno, en particular con otras moléculas y con los espines nucleares, destruye de manera muy eficiente la coherencia cuántica. Como se discute en las secciones precedentes, la condición  $\Delta_m \ll \xi_{\text{dip}}$  se cumple para todos los dobletes  $\pm m$ , con la excepción de los que se encuentran más próximos al tope de la barrera de energía de anisotropía. El estado fundamental representa, por supuesto, el caso extremo. Tomando como ejemplo los clusters que se han mencionado en las secciones anteriores, en orden creciente del número de átomos,  $\Delta_S/k_B \simeq 10^{-4}$  K para el  $\text{ErW}_{10}$ ,  $10^{-6}$  K para el  $\text{Mn}_4\text{Cl}$ ,  $10^{-8}$  K para el  $\text{Fe}_8$  y finalmente  $10^{-10}$  K para el  $\text{Mn}_{12}$ .

Los materiales moleculares presentan, sin embargo, una importante ventaja que les confiere especial interés para el estudio de coherencia cuántica a escala macroscópica. En muchos casos, los ejes de anisotropía de todas las moléculas están alineados entre sí (ver Fig. 12). Gracias a esta propiedad, es posible estudiar la respuesta magnética en función de la orientación del campo magnético. La respuesta a campos longitudinales llevó al descubrimiento del efecto túnel resonante. La aplicación de campos transversales permite algo imposible en el caso de una partícula material: modificar la “masa efectiva de efecto túnel”.

En presencia de un campo magnético transversal  $H_\perp$ , el Hamiltoniano de cualquier

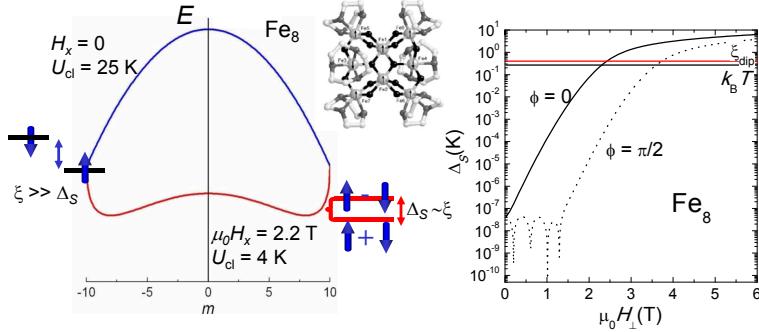


Figura 23.— Izquierda: Potencial clásico  $E = -DS_z^2 - E(S_x^2 - S_y^2)$  de  $\text{Fe}_8$ , calculado para espines rotando en el plano  $xz$ . Se muestra el cálculo a campo nulo y en presencia de un campo magnético aplicado a lo largo de  $x$ . El inset muestra la estructura magnética del cluster. Derecha: Desdoblamiento por efecto túnel del doblete fundamental de  $\text{Fe}_8$ , calculado en función del campo transversal  $H_\perp$ . Se indican también los valores de la energía térmica correspondiente a los experimentos de calor específico descritos en el texto y del “bias.<sup>a</sup>sociado a las interacciones dipolares.

molécula-imán se puede escribir como sigue

$$\mathcal{H} = -DS_z^2 + \mathcal{H}' - g\mu_B H_\perp (S_x \cos \phi + S_y \sin \phi) \quad (33)$$

donde  $\mathcal{H}'$  agrupa los restantes términos de anisotropía y  $\Phi$  es el ángulo que el campo magnético forma con el eje  $x$ . Debido a la no commutación de las componentes  $S_x$  y  $S_y$  con  $S_z$ , el término de Zeeman juega un papel semejante al de la energía cinética de una partícula material, con la diferencia de que en el caso magnético esta energía puede ser sintonizada, simplemente variando la magnitud de  $H_\perp$ .

Como la Fig. 23 muestra de manera esquemática para el caso del  $\text{Fe}_8$ , un campo magnético aplicado en la dirección  $x$  reduce la barrera  $U_{\text{cl}}$  manteniendo simetría del potencial. El campo tiene una influencia enorme sobre todos los desdoblamientos  $\Delta_m$ , que pueden hacerse mayores que las perturbaciones  $\xi_{\text{hf}}$  y  $\xi_{\text{dip}}$  responsables de la decoherencia. Cada vez que esto ocurre, se abre un canal de efecto túnel para la relajación del espín, más próximo al estado fundamental y, por tanto, con una menor energía de activación [49, 103].

Este efecto se puede observar en el laboratorio usando experimentos de calor específico dependientes del tiempo [103, 131, 132, 96]. Como muestra la Fig. 24, la contribución magnética  $c_m$  al calor específico del  $\text{Fe}_8$  presenta, a campo nulo, una caída abrupta en torno a una temperatura  $T_b \simeq 1,3$  K. Esta temperatura depende del tiempo característico de la medida [132] y corresponde, por tanto, al bloqueo superparamagnético de los espines moleculares que son ya incapaces de alcanzar su estado de equilibrio térmico. La aplicación de un campo magnético  $H_\perp$  reduce  $T_b$ , indicando que la energía de activación  $U$  también disminuye como resultado de la existencia de efecto túnel por niveles cada vez

más próximos al fundamental.

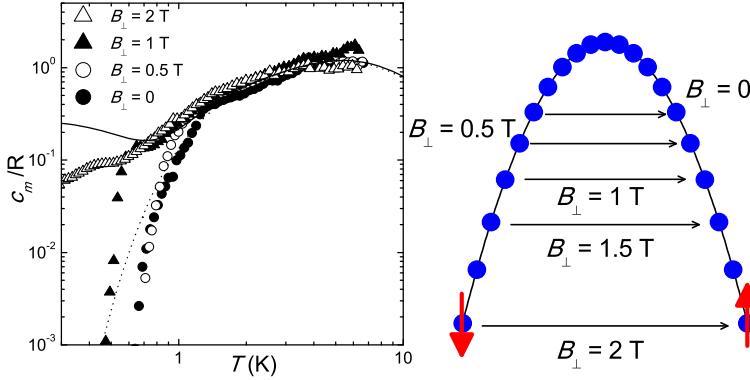


Figura 24.— Izquierda: Dependencia con la temperatura de la contribución magnética  $c_m$  al calor específico de  $\text{Fe}_8$ , medido en presencia de campos magnéticos transversales de magnitud creciente. La línea sólida representa el calor específico de equilibrio calculado a campo nulo. Derecha: Caminos de efecto túnel para los diversos valores de campo magnético.

Eventualmente, incluso  $\Delta_S$  del estado fundamental puede hacerse mayor que  $\xi_{\text{dip}}$  (ver Fig. 23). Bajo estas condiciones, el desdoblamiento del estado fundamental debería estar dominado por  $\Delta_S$  y las funciones de onda ser superposiciones de los estados  $|\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$ . El desdoblamiento del estado fundamental da lugar a una contribución a  $c_m$  que adopta, en equilibrio térmico, la forma de una anomalía de Schottky

$$c_{\text{Schottky}} = R \left( \frac{\Delta_S}{k_B T} \right)^2 \frac{\exp \left( \frac{\Delta_S}{k_B T} \right)}{\left[ 1 + \exp \left( \frac{\Delta_S}{k_B T} \right) \right]^2} \quad (34)$$

que presenta un máximo cuando  $k_B T \simeq 0,42 \Delta_S$ . Resulta, por tanto, posible detectar este desdoblamiento cuántico mediante experimentos de calor específico realizados a bajas temperaturas y en presencia de campos magnéticos  $H_{\perp}$  suficientemente grandes.

La Fig. 25 muestra el calor específico magnético  $c_m$  de una muestra orientada de  $\text{Fe}_8$ , medido a  $T = 0,27$  K en función de  $H_{\perp}$ . El calor específico muestra un máximo centrado en torno a  $2,5 - 3$  T. La posición de este máximo está de acuerdo con los valores de campo magnético para los que se espera que  $\Delta_S$  sea del orden de la energía térmica. De hecho, la curva completa muestra un muy buen acuerdo con el calor específico calculado a partir de los niveles de energía cuánticos de la molécula de  $\text{Fe}_8$ . Estos experimentos muestran, de manera directa, la existencia de un desdoblamiento finito  $\Delta_S$ , en claro contraste con el comportamiento esperado para un momento magnético clásico, cuyos estados  $|\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$  permanecen degenerados en presencia de un campo transversal.

Estos resultados, y otros similares obtenidos para diferentes moléculas-imán, tales como  $\text{Mn}_4$  y  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$  [131, 132, 133], muestran como la aplicación de campos magnéticos transversales permite hacer que estados superpongan de diferentes orientaciones del

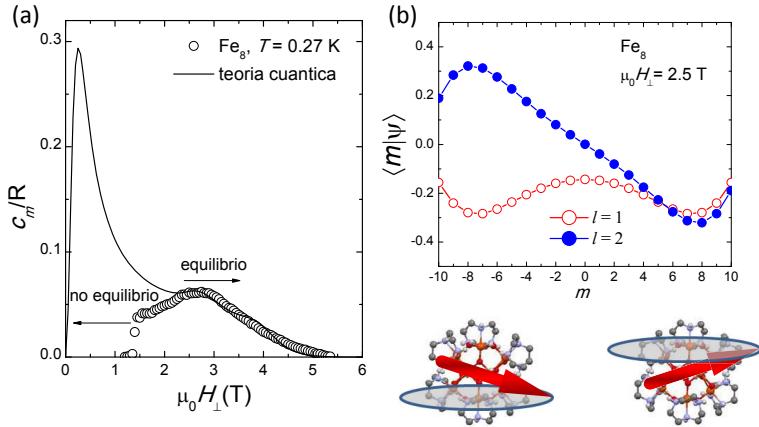


Figura 25.— Izquierda: Calor específico de una muestra de microcristales de  $\text{Fe}_8$  orientados. La línea continua muestra el calor específico calculado usando los niveles cuánticos de  $\text{Fe}_8$ , con una distribución uniforme de las orientaciones de los ejes de anisotropía entre 81 y 90 grados. La contribución que aparece a bajo campo proviene de aquellos cristales cuyos ejes no son perfectamente perpendiculares al campo magnético. No se observa experimentalmente porque los espines sólo alcanzan el equilibrio térmico, en las escalas de tiempo del experimento, para  $H_{\perp} \gtrsim 1,7$  T. Derecha: Funciones de ondas de los dos estados del doblete fundamental de  $\text{Fe}_8$  para  $H_x = 2,5$  T. En el panel inferior, se muestran, de manera esquemática, los dos estados clásicos (con  $\mu_z = \pm 6\mu_B$ ) que componen la superposición cuántica, o estado de “gato de Scrödinger”.

espín, es decir, “gatos de Schrödinger magnéticos”, sean estables frente a la acción de la decoherencia. A la derecha de la Fig. 25 se representa la función de onda del  $\text{Fe}_8$  en un campo magnético de 2,5 T. El estado fundamental  $|\psi_1\rangle$  puede verse como la superposición simétrica de dos funciones de onda localizadas a ambos lados de la barrera de potencial, con momentos magnéticos promedios  $\pm 6\mu_B$  a lo largo del eje  $z$ .

Cabe preguntarse si estos dos estados son realmente macroscópicamente diferentes. En este sentido, es importante resaltar que, además de la magnitud del momento magnético, un parámetro importante para medir el grado de “macroscopidad” es el del número  $\mathcal{D}$  de partículas elementales que está involucradas en la definición de dichas funciones de onda [134]. En el caso del  $\text{Fe}_8$ , el estado magnético resulta de la superposición de las funciones de onda de más de 100 electrones. Sin ser realmente macroscópico, este número es, sin embargo, mucho mayor que  $\mathcal{D} = 2$ , que caracteriza el estado cuántico de un material superconductor al ser producto de estados de pares electrónicos de Cooper. La dificultad de asociar  $\mathcal{D}$  a las dimensiones externas del material se ve ilustrado por el hecho de que  $\mathcal{D} = 2$  incluso en el caso de algunos dispositivos superconductores, como la llamada “caja de pares de Cooper” [135]. A pesar de que la caja mide algo más de una micra, sus funcionamiento involucra tan sólo la superposición entre los estados “dentro” “fuera” un par de Cooper.

Superposiciones cuánticas entre estados con un grado  $\mathcal{D}$  de “desconexión” mayor que el de las moléculas-imán han sido observadas sólo en la última década. Por ejemplo, experimentos de difracción realizados con moléculas de C<sub>60</sub> [136] corresponden a  $\mathcal{D} = 1048$ . Valores aún mayores, del orden de  $\mathcal{D} = 10^6$  se consiguen en estados de un qubit de flujo [25, 26], que corresponden a la superposición coherente de corrientes superconductoras circulando en sentidos opuestos a lo largo de un anillo SQUID. Estos experimentos, junto con los realizados sobre las moléculas-imán, demuestran que, bajo las condiciones adecuadas, las leyes cuánticas siguen teniendo validez en la escala mesoscópica, intermedia entre los mundos atómico y macroscópico.

## 7. Hacia una futura tecnología cuántica: qubits moleculares

### 7.1. Nuevos materiales basados en moléculas-imán

Gracias a sus propiedades físicas, los materiales moleculares se consideran prometedores para diversas aplicaciones tecnológicas. Entre ellas, se encuentran las de almacenamiento de información (moleculas-bit) [71], el procesamiento cuántico de información (qubits moleculares de espn) [138, 137, 139, 140] e incluso la refrigeración magnética [141, 142, 143]. Estudiar sus propiedades fundamentales es tan sólo un paso previo hacia una verdadera nanotecnología molecular. Para este fin, es vital controlar la capacidad de funcionalizar, ensamblar y organizar nanoestructuras y finalmente integrarlas en dispositivos de estado sólido.

La integración de moléculas-imán en dispositivos choca con dificultades prácticas. A la necesidad de mejorar las propiedades básicas (por ejemplo, aumentar la temperatura de bloqueo por debajo de la que se observa la histeresis, mejorar el cambio de entropía inducido por campos magnéticos externos, o reducir la decoherencia cuántica), se une la de procesar estos materiales de manera adecuada, distinta a la del cristal molecular favorecida por la Naturaleza. Las tres aplicaciones mencionadas anteriormente requieren, por ejemplo, que el material pueda depositarse sobre un sustrato formando una capa molecular, bien para permitir acceder a la información almacenada, en el caso de aplicaciones en tecnología de la información, o bien para permitir el contacto térmico en el caso de la refrigeración magnética. Durante los últimos 5 – 7 años, numerosos grupos de investigación han desarrollado métodos para preparar films moleculares usando diversas técnicas [144]. A pesar del progreso alcanzado, es preciso mejorar aspectos para conseguir al mismo tiempo cubrir regiones relativamente grandes (por encima de unas pocas micras) manteniendo al mismo tiempo un cierto control sobre el orden molecular.

El procesado de los materiales ofrece también una atractiva vía hacia la fabricación de materiales multifuncionales [145], es decir, que combinen las propiedades magnéticas de la molécula imán con otras propiedades ópticas, eléctricas, etc, del material que sirve

como “anfitrión”. Un ejemplo reciente [146], visualmente atractivo, de moléculas-imán que forman un cristal líquido se muestra en la Fig. 26. En este contexto, cabe resaltar la posibilidad de realizar dispositivos de espintrónica, por ejemplo usando moléculas-imán individuales para mediar el transporte de corriente entre dos nanocontactos metálicos [147]. Este tipo de dispositivos pueden utilizarse para la realización de nano-interruptores eléctricos controlables por un campo magnético, la generación de micro-ondas o bien para manipular el estado magnético de una molécula usando una corriente eléctrica polarizada en espín [148].

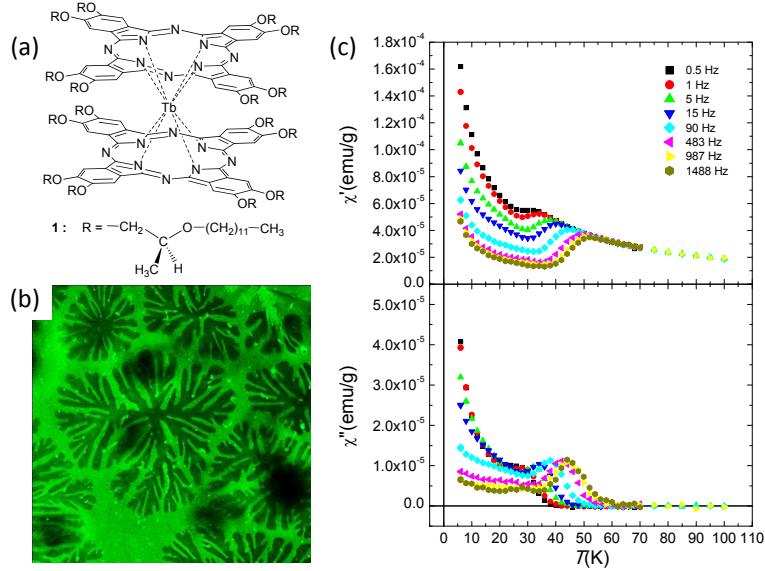


Figura 26.— (a) Estructura química de la ftalocianina de  $Tb$ . (b) Imagen de microscopía óptica que muestra la estructura en abanico del compuesto molecular en su fase de cristal líquido, a  $T = 25$  C. (c) Curvas de susceptibilidad magnética ac, que muestran la dependencia con la frecuencia característica de una molécula-imán.

Para que estas promesas sean realizables, resulta también crucial asegurar que las moléculas mantienen sus propiedades físicas intactas cuando se preparan en condiciones diversas. Dos de los fenómenos más característicos de las moléculas-imán son la memoria magnética, es decir, el fenómeno de histéresis, y el efecto túnel de espín. Para investigar estos efectos materiales, resulta especialmente conveniente comparar las propiedades de un mismo cluster molecular en dos realizaciones materiales diferentes y bien definidas. El cluster de  $Mn_{12}$  presenta características que le hacen un candidato muy adecuado para esta investigación, ya que dicho cluster puede ser sintetizado en combinación con muy diversos ligandos orgánicos, que abren la puerta a diferentes procesados.

La Fig. 27 muestra un ejemplo especialmente llamativo [149], por su posible interés tecnológico. Nanopartículas de  $[Mn_{12}O_{12}(RCOO)_{16}(H_2O)_4]$  (donde  $R$  es un ligando alquilo o arilo) han sido sintetizadas usando un proceso químico que involucra la formación de una red polimérica de clusters de  $Mn_{12}O_{12}$ , mediante la sustitución de los ligandos

$\text{RCOO}^-$  por moléculas de ácido 1,4-fenilenodiáctico ditópico, seguida de la precipitación de este polímero en disolución. El proceso da lugar a nanoesferas de unos 24 nm de diámetro con una estrecha distribución de tamaños. La Fig. 27 muestra también datos de susceptibilidad magnética ac, que resultan ser muy semejantes a los medidos sobre variedades policristalinas de  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$ . Este estudio revela que los clusters preservan casi intacto su espín molecular  $S = 10$  y su anisotropía, así como la histéresis magnética que presenta los saltos característicos del efecto túnel a campos resonantes  $H_n \simeq n \times 4$  kOe, muy similares también a los observados en  $\text{Mn}_{12}\text{Ac}$ .

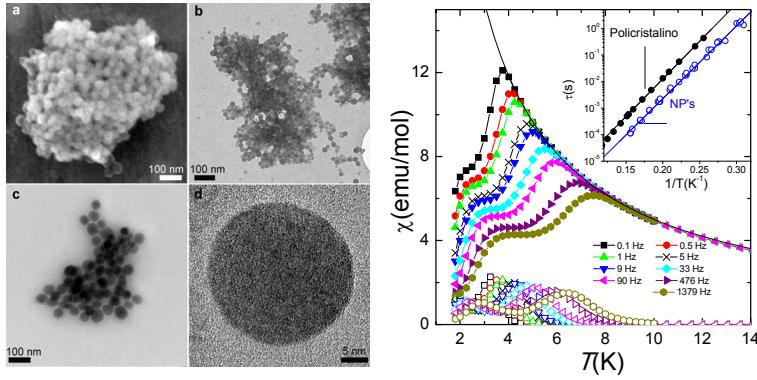


Figura 27.— Izquierda: (a) Imagen de microscopía electrónica de barrido (SEM) de nanopartículas de  $\text{Mn}_{12}$ . (b-d) Imágenes de microscopía electrónica de transmisión (TEM) de las mismas nanopartículas, en orden creciente de resolución. Derecha: Curvas de susceptibilidad magnética ac medidas a diferentes frecuencias. El inseto muestra el tiempo de relajación de las nanopartículas (NP's) comparado con el de  $\text{Mn}_{12}$  cristalino. Las líneas son ajustes de Arrhenius [Ec. (4)].

Otro parámetro importante, además del tamaño, es la estructura cristalina del material, que lógicamente ha de romperse al procesar las moléculas-imán con la vista puesta en sus posibles aplicaciones. Muy recientemente [93], se ha llevado a cabo un estudio del efecto que el desorden cristalino tiene sobre la relajación magnética y el efecto túnel de espín en clusters de benzoato de  $\text{Mn}_{12}$ . A diferencia del acetato de  $\text{Mn}_{12}$ , la estructura de este compuesto molecular no contiene moléculas intersticiales [150], lo que permite estudiar de forma aislada el efecto del orden cristalino. En la Fig. 28 se comparan dos casos extremos: una muestra muy cristalina y un material prácticamente amorfo, obtenido mediante un precipitación rápida en disolución. Los resultados muestran, como en el caso anterior, que el desorden afecta muy poco al tiempo de relajación magnético, así como a las probabilidades de efecto túnel. De hecho, valores de  $\tau$  y  $U$  en buen acuerdo con el experimento se obtienen usando el modelo descrito en la sección 4, considerando sólo aquéllos términos de anisotropía permitidos por la simetría tetragonal de la molécula no distorsionada [Ec. (12)].

Los resultados desvelan, sin embargo, que el empaquetamiento espacial de las molécu-

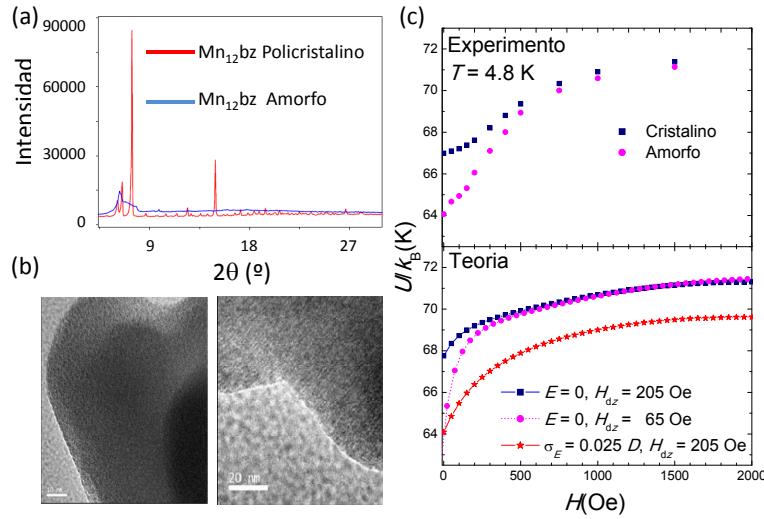


Figura 28.— (a) Difractogramas de RX en polvo, medidos a temperatura ambiente, de las muestras cristalina y amorfa de  $\text{Mn}_{12}\text{bz}$ . (b) Imágenes de TEM de alta resolución de las muestras amorfa (izquierda) y cristalina (derecha). (c) Arriba: Energía de activación promedio obtenida de datos del tiempo de relajación  $\tau$  medidos para ambas muestras a  $T = 4,8\text{ K}$ . Abajo: Energías de activación promedio obtenidas mediante cálculos basados en el modelo de la sección 4 a la misma temperatura para tres grupos de parámetros que representan las siguientes situaciones físicas: a) el material cristalino, con una perfecta simetría molecular de orden 4 ( $E = 0$  and  $H_{\text{dip},z} = 205\text{ Oe}$ ); b) el material desordenado, asumiendo que la simetría molecular permanece intacta y que las interacciones dipolares dan lugar a un campo  $H_z = 65\text{ Oe}$ , más débil que en el cristal; y c) el material desordenado, donde se considera que existe una distribución Gaussiana, de anchura  $\sigma_E = 0,025D$ , del parámetro  $E$  asociado con una distorsión ortorrómbica de la molécula inducida por tensiones [113, 114].

las ejerce una influencia sutil sobre el mecanismo de relajación por efecto túnel. Como se muestra a la derecha de la Fig. 28, la energía de activación  $U$  asociada a la inversión del espín es, a campo nulo, ligeramente menor en el caso del material amorfo. Sin embargo, al aplicar un campo magnético los valores de  $U$  medidos en ambos materiales tienden a converger. Este resultado puede interpretarse usando el marco teórico descrito en la sección 4. En un material amorfo, la distribución de campos dipolares tiene un carácter más isótropo que en un cristal. Como resultado, el valor típico de  $H_{z,\text{dip}}$  puede reducirse a expensas de las componentes transversales  $H_{x,\text{dip}}$  y  $H_{y,\text{dip}}$ . Debido a este efecto, en el material amorfo se abren, para algunas moléculas, caminos de efecto túnel que están virtualmente prohibidos en el cristalino. Este efecto desaparece, lógicamente, cuando el campo aplicado sobrepasa en magnitud a los campos dipolares, en buen acuerdo con el experimento como muestran los resultados de simulaciones numéricas, incluidos también en la Fig. 28.

Podemos concluir que es posible procesar moléculas-imán en diversas formas materia-

les preservando propiedades fundamentales, como su espín y anisotropía magnética. Los fenómenos de memoria magnética y efecto túnel, que forman la base de algunas de las potenciales aplicaciones son, también, intrínsecos a cada molécula individual. Conclusiones semejantes se derivan de estudios realizados sobre disoluciones congeladas de otros derivados de Mn<sub>12</sub> [151, 152, 153]. Esto no significa, obviamente, que el desorden no pueda tener una influencia, incluso dominante, en situaciones en las que la molécula se somete a tensiones importantes. Esto ocurre, por ejemplo, cuando los clusters se depositan sobre sustratos sólidos [154] o bien cuando el proceso de cristalización se interrumpe de forma abrupta, como ocurre, por ejemplo, en nanopartículas de Mn<sub>12</sub> preparadas en presencia de fluidos comprimidos [155].

## 7.2. *Qubits moleculares*

Los bits de información de un ordenador actual, o “clásico”, pueden estar en estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ . Un ordenador cuántico [156, 162, 158], cuando exista, será una máquina que gestione “quantum bits”, ó qubits, que admiten superposiciones de ambos como  $|0\rangle + |1\rangle$ . La cuestión de si la incertidumbre cuántica afectará al funcionamiento de los ordenadores aparece, de manera natural, si se tiene en cuenta la rápida disminución en el tamaño de sus componentes básicos que ha tenido lugar, de manera ininterrumpida, desde la aparición de las primeras máquinas de cálculo. Afortunadamente, la introducción de nuevas reglas puede también dar lugar a nuevas posibilidades, que permitan a los ordenadores cuánticos resolver problemas que son inabordables con la tecnología actual.

En los años 1980 y 1990 R. Feynman [159], P. Shor [160] y L. Grover [161], entre otros, mostraron que el “paralelismo cuántico” asociado con el manejo de superposiciones simplifica la simulación de nuevos materiales, el desencriptado de mensajes, la búsqueda en bases de datos y permite además realizar tareas, como la teleportación segura de mensajes, imposibles para dispositivos convencionales. De forma semejante a un ordenador convencional, cualquier cálculo u operación lógica se puede descomponer en la aplicación sucesiva de operaciones lógicas elementales [162]. En un ordenador cuántico, estas operaciones lógicas universales son dos: 1) la rotación unitaria de un qubit, que crea, a partir de un estado  $|0\rangle$  ó  $|1\rangle$ , un estado superposición  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  y 2) puertas lógicas cuánticas que operan sobre dos qubits acoplados. En la Fig. 29 se muestra la operación de una de estas puertas “universales”, la CNOT cuántica. Esta puerta cambia el estado de un qubit si y sólo si el estado del otro qubit, que actúa como control, es  $|1\rangle_c$ .

Tomando prestado el título de un famoso artículo de R. Landauer [163], “la información es física”. Es decir, los elementos básicos, qubits y puertas lógicas necesitan un soporte material. En la última década, se han propuesto diversas propuestas para la realización del “hardware cuántico. Avances significativos se han logrado, por ejemplo, usando los niveles

Qubit	CNOT
$ 0\rangle \rightarrow \alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$	$ 0\rangle_c \otimes  0\rangle \rightarrow  0\rangle_c \otimes  0\rangle$
	$ 0\rangle_c \otimes  1\rangle \rightarrow  0\rangle_c \otimes  1\rangle$
$ 1\rangle \rightarrow \alpha 1\rangle + \beta 0\rangle$	$ 1\rangle_c \otimes  0\rangle \rightarrow  1\rangle_c \otimes  1\rangle$
	$ 1\rangle_c \otimes  1\rangle \rightarrow  1\rangle_c \otimes  0\rangle$

Figura 29.— Tabla de operaciones lógicas de los dos elementos básicos de un ordenador cuántico universal.

cuánticos de iones atrapados en trampas ópticas para encriptar los estados de un qubit [164, 165]. También es posible implementar operaciones sobre qubits e incluso puertas lógicas usando técnicas de resonancia magnética nuclear para inducir transiciones entre niveles de espines nucleares en moléculas orgánicas [166].

Estos candidatos presentan, sin embargo, dificultades a la hora de fabricar arquitecturas complejas, que involucren más de 6 – 8 qubits. Candidatos de estado sólido son, por este motivo, de especial interés. Resultados esperanzadores se han obtenido usando qubits y qugates basados en dispositivos superconductores [167, 168, 169], y dots cuánticos fabricados con semiconductores [170]. Teniendo en cuenta la existencia de los fenómenos, efecto túnel y estados superposición, descritos en las secciones anteriores, resulta natural considerar también qubits basados en los estados cuánticos, por ejemplo  $|\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$ , de espines electrónicos [138, 137, 139].

Estos candidatos magnéticos presentan algunas ventajas como la facilidad de inicializar el estado de los qubits, para lo que basta con aplicar un campo magnético suficientemente intenso, y la detección de la señal magnética asociada a los estados de información. Además, la química molecular permite, en principio, diseñar las propiedades del qubit así como fabricar redes organizadas y macroscópicas de qubits idénticos. Finalmente, las operaciones cuánticas pueden llevarse a cabo mediante la aplicación de pulsos resonantes de radiación electromagnética, que inducen oscilaciones de Rabi de frecuencia  $\Omega_R \propto \langle \psi_2 | \mathbf{h} \mathbf{S} | \psi_1 \rangle$  entre diferentes estados electrónicos  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$ . Un parámetro clave para evaluar la bondad un qubit es el factor de calidad  $q$ , definido como el cociente entre el tiempo de decoherencia  $\tau_\Phi$  y el periodo  $2\pi/\Omega_R$  de la oscilación de Rabi. El objetivo es encontrar candidatos materiales con el máximo valor de  $q$  que sea posible.

Moléculas de alto espín y elevada anisotropía presentan, en presencia de campos magnéticos transversales de suficiente intensidad (ver Fig. 25), estados cuánticos  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  que permiten codificar los estados de base de un qubit. Resulta, sin embargo, más sencillo utilizar moléculas con un espín neto  $S = 1/2$ , lo que, además de requerir campos menos intensos, reduce la decoherencia generada por los campos magnéticos dipolares. La

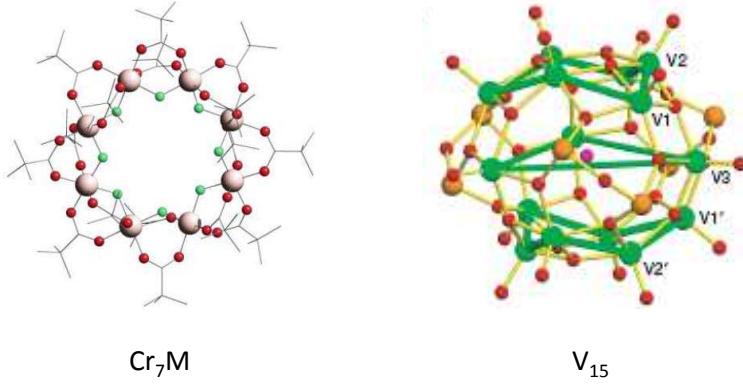


Figura 30.— Qubits moleculares. Izquierda: Estructura molecular del cluster  $\text{Cr}_7\text{M}$ , donde  $\text{M}$  es un ión metálico. Cuando  $\text{M}=\text{Ni}$ , las interacciones antiferromagnéticas dan lugar a que el anillo presente un espín neto  $S = 1/2$  y pueda, por tanto, codificar los dos estados de un qubit. Derecha: Estructura molecular del cluster de  $\text{V}_{15}$ . El acople antiferromagnético de los dos anillos de  $\text{V}_6$ , unido a la frustración magnética en el triángulo central, dan lugar también a un estado fundamental con  $S = 1/2$ .

Fig. 30 muestra dos moléculas de estas características, formadas, en un caso, por anillos de  $\text{Cr}_7\text{M}$  y, en otro, por un cluster de  $\text{V}_{15}$ . En ambos, experimentos de resonancia electrónica paramagnética [171, 172] han mostrado tiempos de decoherencia  $\tau_\Phi \simeq T_2 \sim 0,1 - 1\mu\text{s}$ , equivalentes a  $q \simeq 5 - 10$  y similares a los observados en los mejores qubits superconductores.

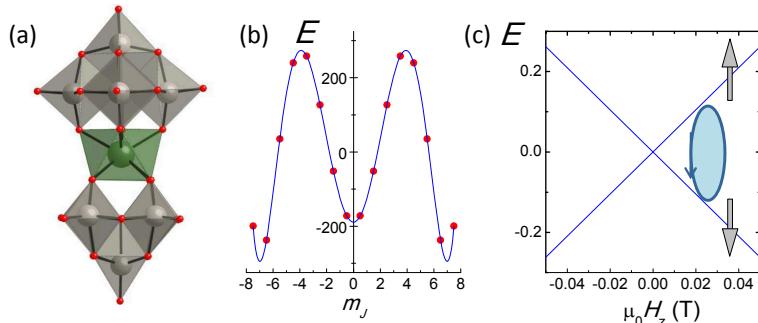


Figura 31.— (a) estructura molecular del cluster de  $\text{ErW}_{10}$ , con el ión de tierra rara en el centro. (b) Estructura de niveles de energía magnéticos a campo nulo. (c) Desdoblamiento del doblete fundamental inducido por un campo  $H_z$ . La existencia de dos niveles bien separados del resto, así como de un importante solapamiento entre las funciones de onda permite llevar a cabo rotaciones unitarias, es decir, oscilaciones de Rabi, sobre este qubit, aplicando radiación electromagnética.

Una posibilidad alternativa es la de utilizar qubits de alto espín, que son más fácilmente manipulables y detectables, pero más simples que  $\text{Fe}_8$  o  $\text{Mn}_{12}$ , es decir, formados por un reducido número de átomos magnéticos [173, 174]. El aumento de  $\Delta$  permite entonces un mayor solapamiento entre las funciones de onda del estado fundamental, incluso a campo nulo, y aumenta, por tanto,  $\Omega_R$ . Un ejemplo particularmente simple es el de los clusters de

la familia RW<sub>10</sub> [126], en los que un ión individual de tierra rara ( $\text{Er}^{3+}$ ,  $\text{Tm}^{3+}$ ,  $\text{Ho}^{3+}$ , etc) está encapsulado entre dos clusters de polioxometalato. La Fig. 31 muestra la estructura de niveles de energía del ErW<sub>10</sub>. El desdoblamiento inducido por el campo cristalino estabiliza un doblete, que se encuentra separado del resto por una energía de unos 40 K. Además, como se ha descrito en la sección 5.3, se observan rápidos procesos de efecto túnel entre los estados del doblete fundamental, lo que indica la existencia de un importante solapamiento entre sus funciones de onda. Otra de las atractivas propiedades de estos materiales es que, debido a su composición y a la existencia de isótopos de Er con  $I = 0$ , es posible preparar compuestos que estén libres de espines nucleares, evitando así una importante fuente de decoherencia. Es asimismo posible reducir el tiempo de relajación  $T_1$  (ver Fig. 22) sustituyendo algunos iones de  $\text{Er}^{3+}$  por otros no magnéticos, como el  $\text{Y}^{3+}$ . Experimentos muy recientes realizados sobre HoW<sub>10</sub> demuestran la posibilidad de realizar oscilaciones de Rabi y permiten estimar un valor de  $T_2 \gtrsim 0.1\mu\text{s}$  [175].

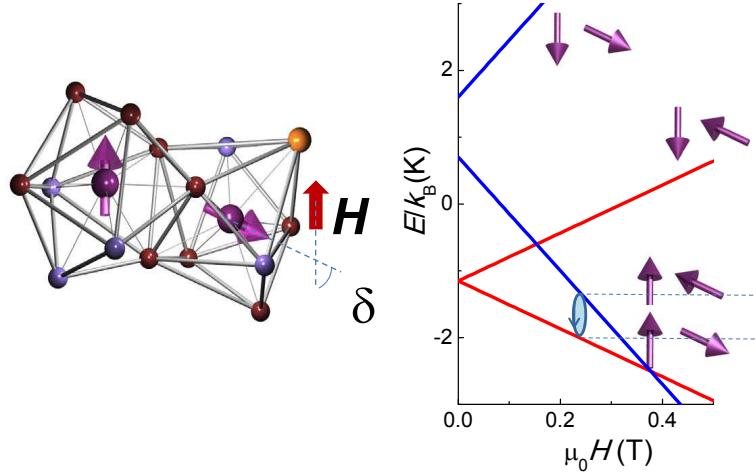


Figura 32.— Izquierda: Estructura molecular de un dímero de Tb<sub>2</sub>. Cada ión de Tb se encuentra en un entorno de coordinación diferente, que da lugar a un desalineamiento  $\delta$  entre sus ejes de anisotropía locales. Derecha: Espectro de niveles de energía magnéticos del dímero. La ausencia de degeneración entre las diferentes transiciones permite seleccionar una de ellas variando la frecuencia de la radicación externa frecuencia o el campo magnético aplicado. La transición señalada en la figura corresponde a la operación de una puerta CNOT cuántica.

Además de los qubits, el segundo ingrediente básico de un ordenador cuántico es la puerta lógica, formada por dos qubits acoplados. Partiendo de los qubits basados en lantánidos, y siguiendo con la idea de la sencillez, la molécula más simple que puede servir para realizar una de estas puertas es un dímero formado por dos iones de tierra rara, como el cluster de Tb<sub>2</sub> que muestra la Fig. 32 [176]. En este cluster, la estructura electrónica de cada ión presenta un doblete fundamental, bien aislado del resto por una energía de más de 100 K. Los dos espines se acoplan antiferromagnéticamente entre sí.

Aún siendo necesaria, la existencia de interacciones débiles entre dos qubits no es, sin embargo, suficiente para la realización de una puerta lógica. En el caso de una puerta CNOT, es preciso que exista además una cierta asimetría entre ambos qubits, que permita identificar a uno de ellos como el qubit de control. En el caso de la molécula de  $Tb_2$ , esta asimetría se ha conseguido gracias a la habilidad de la síntesis química de modificar el entorno de cada ión magnético mediante la elección de los ligandos adecuados. Este entorno asimétrico se traduce en un desalineamiento de los ejes de anisotropía. En presencia de un campo magnético homogéneo, el espectro de energía no presenta degeneración entre ninguna de las posibles transiciones que pueden inducirse mediante la aplicación de radiación electromagnética. Seleccionando una de ellas, por ejemplo la que une los estados  $|\uparrow\rangle_c \otimes |\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle_c \otimes |\uparrow\rangle$  (ver Fig. 32) es posible, en principio, llevar a cabo la operación característica de una puerta CNOT cuántica.

## 8. Conclusiones

En las páginas precedentes, se ha tratado de dar una visión coherente de la investigación del efecto túnel en magnetismo, un fenómeno que había sido virtualmente ignorado hasta la década de 1980, pero que hoy constituye un campo muy activo. Existen buenas razones para ello. Los nanomateriales moleculares, o moléculas-imán, permiten estudiar el magnetismo en una región intermedia entre los mundos microscópico y macroscópico, previamente inaccesible. Experimentos realizados sobre estos materiales han proporcionado las primeras pruebas irrefutables de que fenómenos como el efecto túnel, las superposiciones cuánticas de estados e incluso fenómenos de interferencia, sobreviven más allá de la escala de los átomos. Estos estudios confirman, de nuevo, la solidez de la propia teoría cuántica, y confirman que la observación de dichos fenómenos está principalmente limitada por el fenómeno de la decoherencia. A pesar de que la teoría del efecto túnel se ha desarrollado enormemente, quedan aún algunas incógnitas por resolver. De especial interés, al menos a juicio del autor, es la cuestión de cómo el efecto túnel contribuye a establecer el equilibrio térmico de espines, en la región cercana al cero absoluto.

Los fenómenos mencionados arriba corresponden, en su mayor parte, al comportamiento de espines individuales. Aunque no se ha incluido en esta revisión, por cuestiones de espacio y, sobre todo, de tiempo, los cristales de moléculas imán son también apropiados para estudiar estados cuánticos acoplados, o entrelazados, no sólo entre espines dentro de un cluster complejo [177, 178], sino también en la vecindad de transiciones de fase magnéticas [117, 84]. De hecho, los cristales moleculares han proporcionado algunos de los ejemplos más puros de ordenamiento magnético dipolar [117, 84, 179], del que se conocen muy pocos casos en la Naturaleza. La competición entre este ordenamiento y las fluctuaciones de punto cero, por ejemplo inducidas mediante un campo magnético trans-

versal, puede dar lugar a transiciones de fase orden-desorden incluso a  $T = 0$ . Cristales de nanoimanes moleculares proporcionan, en estas condiciones, excelentes realizaciones de modelos sencillos con transiciones de fase cuánticas, que pueden servir de base para la comprensión de fenómenos más complejos.

Además de servir como sistemas modelo para la investigación de cuestiones fundamentales en física, sus propiedades hacen de estos nanomateriales potenciales candidatos para aplicaciones en campos como el almacenamiento de información, la refrigeración magnética, la espintrónica y la computación cuántica. Una buena noticia es que dichas propiedades son características de cada molécula individual y se mantienen, al menos en muchos casos, cuando se procesan en formas materiales diversas. Aún en su infancia, la perspectiva de realizar bits y puertas lógicas cuánticas usando clusters moleculares ofrece perspectivas muy prometedoras. A diferencia de qubits artificiales, como SQUIDs o dots cuánticos, la síntesis química ofrece un método sencillo y barato de fabricar cantidades macroscópicas de qubits idénticos, con la ventaja de que sus propiedades pueden ser modificadas, casi a voluntad, mediante el diseño de la molécula. El reto, muy considerable, consiste ahora en desarrollar métodos experimentales que permitan manipular el estado cuántico de qubits moleculares individuales, que abra la puerta a la realización de arquitecturas de computación. Una atractiva posibilidad, en la que estamos inmersos, es la fabricación de estructuras híbridas en las que moléculas-imán se integren y acoplen a otros dispositivos de estado sólido, como SQUIDs. Vencer las dificultades a las que se enfrenta este campo va a requerir la colaboración multidisciplinar entre físicos y químicos de diversas especialidades, algo que afortunadamente ha sido bastante habitual durante la investigación del efecto túnel en magnetismo.

## Agradecimientos

La investigación presentada en las páginas anteriores ha sido posible gracias al trabajo conjunto de muchos investigadores. Querría reconocer primero la decisiva influencia de quienes considero mis “padres científicos. Juan Bartolomé ha sido pionero, en Zaragoza y en España, en el desarrollo de un laboratorio dedicado a la física de bajas temperaturas, gracias al cual se han podido llevar a cabo buena parte de los experimentos presentados aquí. Julio Fernández ha contribuido enormemente a la comprensión teórica (por parte de la comunidad científica en general y mía en particular) del efecto túnel de espín. Jos de Jongh ha ayudado a varias generaciones de científicos de nuestra universidad y ha participado an la génesis de lo que hoy conocemos como nanociencia. Y, por último, Javier Tejada, ha sido uno de los impulsores de la investigación del efecto túnel en magnetismo y contribuyó, a través de su colaboración con Juan Bartolomé, a iniciar esta actividad en Zaragoza.

Como es bien sabido, el trabajo duro en cualquier investigación corresponde a los estudiantes de doctorado. Buena parte de los resultados presentados aquí están vinculados a las tesis doctorales de Fabian Mettes, Román López Ruiz, María José Martínez y Enrique Burzurí, a quienes quiero agradecer su dedicación. El contacto con gente joven es una de las mejores remuneraciones de nuestro trabajo.

Es un placer haber colaborado en estos temas, durante ya bastantes años, con personas que han hecho que el trabajo sea, además de productivo, mucho más agradable. Muchas gracias, por ello, a Marco Evangelisti, Javier Campo, Daniel Ruiz-Molina, Guillem Aromí, Chiara Carbonera, José Luis García Palacios, Javier Sesé, Olivier Roubeau, Jesús Chaboy, Jolanta Stankiewicz, Andrea Morello, Conrado Rillo, David Zueco, Luis Miguel García y Fernando Bartolomé. Por supuesto, tampoco puedo olvidar las colaboraciones establecidas con investigadores como George Christou, Eugenio Coronado, Enrique del Barco, Neus Domingo, Dante Gatteschi, Joan Manel Hernández, Garry McIntyre, Roberta Sessoli, Joris van Slageren, Jaume Veciana y X. X. Zhang.

## Referencias

- [1] W. Heisenberg, *Z. Phys.* **43** (1927) 172. Una traducción inglesa de éste y otros artículos pioneros en el desarrollo de la Física Cuántica se pueden encontrar en [15].
- [2] E. Schrödinger, *Naturwissenschaften* **23** (1935), 807; *ibid* **23** (1935), 823 *ibid* **23** (1935), 844. Traducción al inglés en [15].
- [3] M. Born, *Z. Physik* **37** (1926) 863. Traducción al inglés en [15].
- [4] H. P. Robertson, *Phys. Rev. B* **34** (1929) 163.
- [5] F. Hund, *Z. Phys.* **43** (1927) 805.
- [6] D. M. Dennison and G. E. Uhlenbeck, *Phys. Rev.* **41** (1932) 313.
- [7] R. L. Somorjai and D. F. Hornig, *J. Chem. Phys.* **36** (1962) 1980.
- [8] V. Narayanamurti and R. Pohl, *Rev. Mod. Phys.* **42** (1970) 201.
- [9] E. Palacios, J. Bartolomé, R. Burriel and H. B. Brom, *J. Phys. Condens. Matter* **1** (1989) 1119.
- [10] G. Gamow, *Nature* **122** (1928) 805.
- [11] B. D. Josephson, *Phys. Lett.* **1** (1962) 251; *ibid* *Rev. Mod. Phys.* **36** (1964) 216.
- [12] J. C. Gallop, *SQUIDS, the Josephson effects and superconducting electronics*, Adam Hilger series on measurement science and technology, Hilger (Bristol, 1991).

- [13] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber and E. Weibel, Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 57.
- [14] N. Bohr, Nature **121** (1928) 580.
- [15] *Quantum theory and measurement*, editado por J. A. Wheeler y W. H. Zurek, Princeton Series in Physics, Princeton University Press (Princeton, New Jersey, 1983).
- [16] A. J. Leggett, J. Phys.: Condens. Matter **14** (2002) R415.
- [17] E. P. Wigner in *The Scientist Speculates*, editado por I. J. Good, Heinemann (London, 1961), p. 284. Texto reproducido en [15].
- [18] D. Bohm, Phys. Rev. **85** (1952) 166.
- [19] H. Everett III, Rev. Mod. Phys. **29** (1957) 454.
- [20] W. H. Zurek, Phys. Today **44** (1991) 36.
- [21] W. H. Zurek, Rev. Mod. Phys. **75** (2003) 715.
- [22] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Ann. Phys. **149** (1983) 374.
- [23] N. Bohr, *Studier over Metallernes Elektrontheori*, Københavns Universitet (1911).
- [24] H. J. van Leeuwen, J. de Physique et le Radium, **2** (1921) 361.
- [25] J. R. Friedman, V. Patel, W. Chen, S. K. Tolpygo and J. E. Lukens, Nature **406** (2000) 43.
- [26] C. van der Wal, A. ter Haar, F. Wilhelm, R. Schouten, C. Harmans, T. Orlando, S. Lloyd and J. Mooij, Science **290** (2000) 773.
- [27] J. Simonds, Phys. Today **48** (1995) 48.
- [28] Z. Z. Bandić, D. Litvinov and M. Rooks, MRS Bull. **33** (2008) 831.
- [29] L. Néel, Ann. Geophys. **5** (1949) 99.
- [30] W. F. Brown, Phys. Rev. B **130** (1963) 1677.
- [31] C. Kittel, Rev. Mod. Phys. **21** (1949) 541.
- [32] J. Frenkel and J. Dorfman, Nature **126** (1930) 274.
- [33] C. Kittel, Phys. Rev. B **70** (1946) 965.
- [34] A. Aharoni *Introduction to the theory of ferromagnetism*, International series of monographs on physics 109, Oxford University Press (Oxford, 1996).
- [35] E. C. Stoner and E. P. Wohlfarth, Phil. Trans. **A240** (1948) 599.

- [36] I. S. Jacobs and C. P. Bean in *Magnetism*, edited by G. T. Rado and H. Suhl (Academic, New York, 1963), Vol. III, pp. 271-294;
- [37] F. Luis, J. M. Torres, L. M. García, J. Bartolomé, J. Stankiewicz, F. Petroff, F. Fettar, J.-L. Maurice, and A. Vaurés, Phys. Rev B **65** (2002) 094409.
- [38] F. Luis, F. Bartolomé, F. Petroff, J. Bartolomé, L. M. García, C. Deranlot, H. Jaffrè, M. J. Martínez, P. Bencok, F. Wilhelm, A. Rogalev, and N. B. Brookes, Europhys. Lett. **76** (2006) 142.
- [39] H. A. Kramers, Physica **7** (1940) 284.
- [40] H. A. Dürr, S. S. Dhesi, E. Dudzik, D. Knabben, G. van der Laan, J. B. Goedkoop, and F. U. Hillebrecht, Phys. Rev. B **59** (1999) R701.
- [41] P. Gambardella et al., Science **300** (2003) 1130.
- [42] M. Jamet, W. Wernsdorfer, Ch. Thirion, V. Dupuis, P. Mlinon, A. Pérez, and D. Mailly, Phys. Rev. B **69** (2004) 024401.
- [43] P. Gambardella et al., Nature Mater. **8** (2009) 189.
- [44] J. L. García-Palacios and S. Dattagupta, Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 190401.
- [45] J. L. van Hemmen and A. Süto, Europhys. Lett. **1** (1986) 481.
- [46] M. Enz and R. Schilling, J. Phys. C: Condens Matter **19** (1986) 1765 y L711.
- [47] E. M. Chudnovsky and L. Gunther, Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 661.
- [48] D. A. Garanin, J. Phys. A: Math. Gen. **24** (1991) L61.
- [49] F. Luis, J. Bartolomé, and J. F. Fernández, Phys. Rev. B **57** (1998) 505-513.
- [50] W. Wernsdorfer, Adv. Chem. Phys. **118** (2001) 99.
- [51] N. V. Prokof'ev and P. C. E. Stamp, Rep. Prog. Phys. **63** (2000) 669.
- [52] R. de L. Kronig, Physica **6** (1939) 33.
- [53] J. H. Van Vleck, Phys. Rev. **57** (1940) 426.
- [54] R. Orbach, Proc. Roy. Soc. (London) **A264** (1961) 456 y 485.
- [55] K. W. H. Stevens, Rep. Prog. Phys. **30** (1967) 189.
- [56] A. Abragam and B. Bleaney, *Electron paramagnetic resonance of transition ions*, International series of monographs on physics, Oxford Clarendon Press (Oxford, 1970).
- [57] L. Landau, Phys. Z. Sowjetunion **2** (1932) 46.

- [58] C. Zener, Proc. R. Soc. London, **A137** (1932) 696.
- [59] L. Weil, J. Chim. Phys. **51**, 715 (1954).
- [60] C. P. Bean and J. D. Livingston, J. Appl. Phys. Supplement **30** (1959) 120S.
- [61] L. Gunther and B. Barbara (Eds.), *Quantum Tunneling of Magnetization-QTM'94*, NATO ASI Series, Series E: Applied Sciences Vol. 301, Kluwer Academic Publishers (Dordrecht, 1995).
- [62] E. M. Chudnovsky and J. Tejada, *Macroscopic Quantum Tunneling of the Magnetic Moment*, Cambridge Studies in Magnetism, Cambridge University Press (Cambridge, 1998).
- [63] F. Luis, J. Bartolomé, J. Tejada, and E. Martínez, J. Mag. Mag. Mater. **158** (1996) 266.
- [64] R. H. Kodama, A. E. Berkowitz, E. J. McNiff and S. Foner, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 394.
- [65] O. Kahn, *Molecular Magnetism*, Wiley-VCH (New York, 1993).
- [66] J. S. Miller and M. Drillon (Eds.), *Magnetism: Molecules to Materials*, Wiley-VCH (Weinheim, 2002), Vol. III.
- [67] D. Gatteschi, R. Sessoli and J. Villain, *Molecular Nanomagnets*, Oxford University Press (Oxford, 2006).
- [68] G. Christou, D. Gatteschi, D. N. Hendrickson and R. Sessoli, MRS Bull. **25** (2000) 26.
- [69] D. Gatteschi and R. Sessoli, Angew. Chem. Int. Ed. **42** (2003) 268.
- [70] T. Lis, Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Crystallogr. Cryst. Chem. **36** (1980) 2042.
- [71] R. Sessoli, D. Gatteschi, A. Caneschi and M. A. Novak, Nature (London) **365** (1993) 141.
- [72] A.-L. Barra, D. Gatteschi and R. Sessoli, Phys. Rev. B **56** (1997) 8192.
- [73] I. Mirebeau, M. Hennion, H. Casalta, H. Andres, H. U. Güdel, A. V. Irodova and A. Caneschi, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 628.
- [74] R. Bircher, G. Chaboussant, A. Sieber, H. U. Güdel, and H. Mutka, Phys. Rev. B **70** (2004) 212413.
- [75] A.-L. Barra, A. Caneschi, A. Cornia, D. Gatteschi, L. Gorini, L.-P. Heiniger, R. Sessoli and L. Sorace, J. Am. Chem. Soc. **129** (2007) 10754.
- [76] J. L. García-Palacios, J. B. Gong and F. Luis, J. Phys. Cond. Matter. **21** (2009) 456006.
- [77] F. Luis, V. González, A. Millán and J. L. García-Palacios, Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 107201.

- [78] E. Burzurí, Ch. Carbonera, F. Luis, D. Ruiz-Molina, C. Lampropoulos and G. Christou, Phys. Rev. B **80** (2009) 224428.
- [79] J. R. Friedman, M. P. Sarachik, J. Tejada and R. Ziolo, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 3830.
- [80] J. M. Hernández, X. X. Zhang, F. Luis, J. Bartolomé, J. Tejada and R. Ziolo, Europhys. Lett. **35** (1996) 301.
- [81] L. Thomas, F. Lointi, R. Ballou, D. Gatteschi, R. Sessoli and B. Barbara, Nature **383** (1996) 145.
- [82] F. Luis, J. Bartolomé, J. F. Fernández, J. Tejada, J. M. Hernández, X. X. Zhang and R. Ziolo, Phys. Rev. B **55** (1997) 11448.
- [83] J. F. Fernández and J. J. Alonso, Phys. Rev. B **62** (2000) 53.
- [84] F. Luis, J. Campo, J. Gómez, G. J. McIntyre, J. Luzón and D. Ruiz-Molina, Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 227202.
- [85] W. Wernsdorfer, M. Murugesu and G. Christou, Phys. Rev. Lett. **96** (2006) 057208.
- [86] E. M. Chudnovsky, Science 274, 938 (1996)
- [87] B. Schwarzschild, Phys. Today **50** (1997) 17.
- [88] En 2008, la revista Nature incluyó al efecto túnel resonante en su lista de los “hitos” del magnetismo del siglo XX (K. Ziemelis, Nature Milestones Spin, March 2008, S19). El texto no incluye (injustamente a juicio del presente autor) la referencia [80]. Las razones de esta omisión se escapan del ámbito del presente artículo.
- [89] K. Wieghardt, K. Pohl, I. Jibril and G. Huttner, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. **23** (1984) 77.
- [90] S. Carretta, E. Liviotti, N. Magnani, P. Santini, and G. Amoretti, Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 207205.
- [91] A. L Barra., P. Debrunner, D. Gatteschi, Ch.E. Schulz and R. Sessoli, Europhys. Lett. **35** (1996) 133.
- [92] R. Caciuffo, G. Amoretti, A. Murani, R. Sessoli, A. Caneschi and D. Gatteschi, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 4744.
- [93] C. Carbonera, F. Luis, J. Campo, J. Sánchez-Marcos, A. Camón, J. Chaboy, D. Ruiz-Molina, I. Imaz, J. van Slageren, S. Dengler and M. González, Phys. Rev. B **81** (2010) 014427; ver también el resumen *Appreciate the imperfections* en Physics (<http://physics.aps.org/synopsis-for/10.1103/PhysRevB.81.014427>).

- [94] A. Morello, O. N. Bakharev, H. B. Brom, R. Sessoli and L. J. de Jongh, Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 197202.
- [95] A. Morello and L. J. de Jongh, Phys. Rev. B **76** (2007) 184425.
- [96] F. Luis, F. Mettes and L. J. de Jongh, in *Magnetism: Molecules to Materials*, J. S. Miller and M. Drillon (Eds.), Wiley-VCH (Weinheim, 2002), Vol. III pp. 169.
- [97] D. A. Garanin and E. M. Chudnovsky, Phys. Rev B **56** (1997) 11102.
- [98] A. Fort, A. Rettori, J. Villain, D. Gatteschi, and R. Sessoli, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 612.
- [99] M. N. Leuenberger and D. Loss, Europhys. Lett. **46** (1999) 692.
- [100] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Quantum mechanics*, Wiley (New York, 1977).
- [101] N. W. Ashcroft and N. David Mermin, *Solid state physics*, HRW International Edition (Philadelphia, 1976).
- [102] J. F. Fernández, J. Bartolomé and F. Luis, J. Appl. Phys. **83** (1998) 6940.
- [103] J. F. Fernández, F. Luis and J. Bartolomé, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 5659.
- [104] W. Wernsdorfer and R. Sessoli, Science **284** (1999) 133.
- [105] K. M. Mertes, Y. Suzuki, M. P. Sarachik, Y. Paltiel, H. Shtrikman, E. Zeldov, E. Rumberger, D. N. Hendrickson and G. Christou, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 227205.
- [106] W. Wernsdorfer, S. Bhaduri, C. Boskovic, G. Christou and D. Hendrickson, Phys. Rev. B **65** (2002) 180403.
- [107] E. del Barco, A. D Kent, E. M Rumberger, D. N Hendrickson and G Christou Europhys. Lett. **60** (2002) 768.
- [108] E. del Barco, A. D. Kent, E. M. Rumberger, D. N. Hendrickson and G. Christou, Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 047203.
- [109] E. del Barco, A. D. Kent, S. Hill, J. M. North, N. S. Dalal, E. M. Rumberger, D. N. Hendrickson, N. Chakov and G. Christou, J. Low Temp. Phys. **140** (2005) 119.
- [110] W. Wernsdorfer, S. Bhaduri, A. Vinslava and G. Christou, Phys. Rev. B **72** (2005) 214429.
- [111] C. Sangregorio, T. Ohm, C. Paulsen, R. Sessoli and D. Gatteschi, Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 4645.
- [112] W. Wernsdorfer, T. Ohm, C. Sangregorio, R. Sessoli, D. Mailly and C. Paulsen, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 3903.
- [113] E. M. Chudnovsky and D. A. Garanin, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 187203.

- [114] D. A. Garanin and E. M. Chudnovsky, Phys. Rev. B **65** (2002) 094423.
- [115] A. Cornia, R. Sessoli, L. Sorace, D. Gatteschi, A. L. Barra and C. Daiguebonne, Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 257201.
- [116] S. M. J. Aubin, N. R. Dilley, L. Pardi, J. Krzystek, M. W. Wemple, L. C. Brunel, M. B. Maple, G. Christou and D. N. Hendrickson, J. Am. Chem. Soc. **120** (1998) 49981.
- [117] M. Evangelisti, F. Luis, F. L. Mettes, N. Aliaga, G. Aromí, J. J. Alonso, G. Christou and L. J. de Jongh, Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 117202.
- [118] L. Thomas, A. Caneschi and Bernard Barbara, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 2398.
- [119] L. Bokacheva, A. D. Kent and M. A. Walters, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 4803.
- [120] W. Wernsdorfer, A. Caneschi, R. Sessoli, D. Gatteschi, A. Cornia, V. Villar and C. Paulsen, Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 2965.
- [121] N. V. Prokof'ev and P. C. E. Stamp, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 5794.
- [122] J. F. Fernández, Phys. Rev. B **66** (2002) 064423.
- [123] J. F. Fernández and J. J. Alonso, Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 047202.
- [124] J. F. Fernández and Juan J. Alonso, Phys. Rev. B **69** (2004) 024411.
- [125] M. Evangelisti, F. Luis, F. L. Mettes, R. Sessoli and L. J. de Jongh, Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 227206.
- [126] M. A. AlDamen, J. M. Clemente-Juan, E. Coronado, C. Martí-Gastaldo and A. Gaita-Ario, J. Am. Chem. Soc. **130** (2008) 8874.
- [127] M. J. Martínez-Pérez, J. Sesé, F. Luis, D. Drung, T. Schurig, Rev. Sci. Instrum. **81** (2010) 016108.
- [128] F. Luis, M. J. Martínez-Pérez, O. Montero, E. Coronado, S. Cardona-Serra, C. Martí-Gastaldo, J. M. Clemente-Juan, J. Sesé, D. Drung and T. Schurig, Phys. Rev. B **82** (2010) 060403(R).
- [129] I. Waller, Z. Phys. **79** (1932) 370.
- [130] E. M. Chudnovsky and D. A. Garanin, Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 257205.
- [131] F. Luis, F. Mettes, J. Tejada, D. Gatteschi and L. J. de Jongh, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 4377.
- [132] F. L. Mettes, F. Luis and L. J. de Jongh, Phys. Rev. B **64** (2001) 174411.

- [133] F. L. Mettes, G. Aromí, F. Luis, M. Evangelisti, G. Christou, D. Hendrickson and L. J. de Jongh, *Polyhedron* **20** (2001) 1459.
- [134] A. J. Leggett, *Sup. Prog. Theor. Phys.* **69** (1980) 80.
- [135] Y. Nakamura, Yu. A. Paskin and J. S. Tsai, *Nature* **398** (1999), 786.
- [136] M. Arndt, A. Nairz, J. Vos-Andreae, C. Keller, G. van der Zouw and A. Zeilinger, *Nature* **401** (1999) 680.
- [137] M. Leuenberger and D. Loss, *Nature* **410** (2001) 789.
- [138] J. Tejada, E. Chudnovsky, E. del Barco, J. Hernández and T. Spiller, *Nanotechnology* **12** (2001) 181.
- [139] F. Troiani, A. Ghirri, M. Affronte, S. Carretta, P. Santini, G. Amoretti, S. Piligkos, G. Timco and R. E. P. Winpenny, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 207208.
- [140] J. Lehmann, A. Gaita-Arino, E. Coronado and D. Loss, *Nature Nanotechnology* **2** (2007) 312.
- [141] M. Evangelisti, A. Candini, A. Ghirri, M. Affronte, E. K. Brechin and E. J. L. McInnes, *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 072504.
- [142] G. Karotsis, M. Evangelisti, S. J. Dalgarno and E. K. Brechin, *Angew. Chem. (Int. Ed.)* **48** (2009) 9928.
- [143] M. Evangelisti, E. K. Brechin, *Dalton Trans.* **39** (2010) 4672.
- [144] J. Gómez-Segura, J. Veciana, and D. Ruiz-Molina, *Chem. Commun.* **36** 2007, 3699.
- [145] E. Coronado, J. R. Galán-Mascarós, C. J. Gómez-García and V. Laukhin, *Nature* **408** (2000) 447.
- [146] M. Gonidec, F. Luis, Álex Vilchez, J. Esquena, D. B. Amabilino and J. Veciana, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49** (2010) 1623.
- [147] H. B. Heersche, Z. de Groot, J. A. Folk, H. S. J. van der Zant, C. Romeike, M. R. Wegewijs, L. Zobbi, D. Barreca, E. Tondello and A. Cornia, *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006) 206801.
- [148] L. Bogani and W. Wernsdorfer, *Nature Mater.* **7** (2008) 179.
- [149] I. Imaz, F. Luis, C. Carbonera, D. Ruiz-Molina and D. Maspoch, *Chem. Commun.* **10** (2008) 1202.
- [150] R. Sessoli, H.-L. Tsai, A. R. Schake, Sh. Wang, J. B. Vincent, K. Folting, D. Gatteschi, G. Christou and D. N. Hendrickson, *J. Am. Chem. Soc.* **115** (1993) 1804.

- [151] R. Sessoli, D. Rovai, C. Sangregorio, T. Ohm, C. Paulsen and A. Caneschi, J. Magn. Magn. Mater. **177-181** (1998) 1330.
- [152] N. Domingo, B. E. Williamson, J. Gómez-Segura, Ph. Gerbier, D. Ruiz-Molina, D. B. Amabilino, J. Veciana and J. Tejada, Phys. Rev. B **69** (2004) 052405.
- [153] F. El Hallak, J. van Slageren, J. Gmez-Segura, D. Ruiz-Molina, and M. Dressel, Phys. Rev. B **75**, (2007) 104403.
- [154] M. Mannini, F. Pineider, Ph. Sainctavit, L. Joly, A. Fraile-Rodríguez, M.-A. Arrio, Ch. Cartier dit Moulin, W. Wernsdorfer, A. Cornia, D. Gatteschi, R. Sessoli, Adv. Mater. **21**, 167 (2009).
- [155] N. Domingo, F. Luis, M. Nakano, M. Muntó, J. Gómez, J. Chaboy, N. Ventosa, J. Campo, J. Veciana and D. Ruiz-Molina, Phys. Rev. B **79** (2009) 214404.
- [156] S. Lloyd, Sci. American **273** (1995) 140.
- [157] M. A. Nielsen and I. L. Chuang *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press (Cambridge, 2000).
- [158] T. D. Ladd, F. Jelezko, R. Laflamme, Y. Nakamura, C. Monroe and J. L. O'Brien, Nature **464** (2010) 45.
- [159] R. Feynman, Found. Phys. **16** (1986) 507.
- [160] P. W. Shor, *Proc. 35nd Annual Symposium on Foundations of Computer Science* (Shafi Goldwasser Ed.), IEEE Computer Society Press (1994) 124.
- [161] L. K. Grover, *Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing* (1996) 212.
- [162] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum computation and quantum information*, Cambridge University Press (New York, 2000).
- [163] R. Landauer, Phys. Today **44** (1991) 23.
- [164] J. I. Cirac and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 4091.
- [165] D. Wineland and R. Blatt, Nature **453** (2008) 1008.
- [166] I. L. Chuang, L. M. K. Vandersypen, X. L. Zhou, D. W. Leung and S. Lloyd, Nature **393** (1998) 143.
- [167] L. DiCarlo, J. M. Chow, J. M. Gambetta, Lev S. Bishop, B. R. Johnson, D. I. Schuster, J. Majer, A. Blais, L. Frunzio, S. M. Girvin and R. J. Schoelkopf, Nature **60** (2009) 240.

- [168] L. DiCarlo, M. D. Reed, L. Sun, B. R. Johnson, J. M. Chow, J. M. Gambetta, L. Frunzio, S. M. Girvin, M. H. Devoret, and R. J. Schoelkopf, *Nature* **467** (2010) 574.
- [169] M. Neeley, R. C. Bialczak, M. Lenander, E. Lucero, M. Mariantoni, A. D. OConnell, D. Sank, H. Wang, M. Weides, J. Wenner, Y. Yin, T. Yamamoto, A. N. Cleland, and J. M. Martinis, *Nature* **467** (2010) 570.
- [170] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha and L. M. K. Vandersypen, *Rev. Mod. Phys.* **79** (2007) 1217.
- [171] A. Ardavan, O. Rival, J. J. L. Morton, S. J. Blundell, A. M. Tyryshkin, G. A. Timco and Richard E. P. Winpenny, *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 057201.
- [172] S. Bertaina, S. Gambarelli, T. Mitra, B. Tsukerblat, A. Müller and B. Barbara, *Nature* **453** (2008) 203.
- [173] S. Bertaina, S. Gambarelli, A. Tkachuk, I. N. Kurkin, B. Malkin, A. Stepanov and B. Barbara, *Nature Nano* **2** (2007) 39.
- [174] C. Schlegel, J. van Slageren, M. Manoli, E. K. Brechin and M. Dressel, *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008) 147203.
- [175] S. Hill, comunicación privada.
- [176] D. Aguilà, L. A. Barrios, F. Luis, A. Repollés, O. Roubeau, S.J. Teat y G. Aromí, *Inorg. Chem.* **49** (2010), 6784.
- [177] W. Wernsdorfer, N. Aliaga-Alcalde, D. N. Hendrickson and G. Christou, *Nature* **416**, (2002) 406.
- [178] G. Timco *et al*, *Nature Nano.* **4** (2009) 173.
- [179] A. Morello, F. L. Mettes, F. Luis, J. F. Fernández, J. Krzystek, G. Aromí, G. Christou, and L. J. de Jongh, *Phys. Rev. Lett.* **90** (2003) 017206.

# El discurrir de los médicos sobre algunos problemas clásicos de Cálculo de Probabilidades

Miguel Andériz López

Real Academia de Medicina de Zaragoza

## 1. Introducción

Ante todo, deseo manifestar dos cosas. En primer lugar decir que me siento muy honrado por la oportunidad que me brinda hoy la Real Academia de Ciencias de Zaragoza de exponer un tema ante la Corporación. También creo que debo expresar ante este docto auditorio la buena relación que me une a varios de sus miembros, algunos de los cuales han sido profesores míos de Ciencias Matemáticas. Entre ellos, mi emocionado recuerdo para el Profesor Miguel San Miguel, quien me dispensó una cordial y desinteresada amistad, inmerecidamente por mi parte, y cuya pérdida lamentamos todos nosotros.

Lo que voy a exponer son algo más de media docena de situaciones, recopiladas de mi experiencia de más de treinta años de mi vida, una de cuyas facetas ha sido el intento de enseñar nociones de cálculo de probabilidades y de estadística a profesionales de ciencias de la salud, particularmente médicos. En dichas situaciones he podido comprobar cómo la aguda inteligencia de algunos de ellos ha dado solución a problemas que, en condiciones ordinarias, requieren conocimientos de la carrera de matemáticas.

He podido recoger una decena de casos semejantes, parte de los cuales vamos a presentar aquí. Si bien al final haremos un breve comentario, en principio no parece que sea exigible la condición previa de ser médico, pero sí la de poseer unos mínimos conocimientos matemáticos, que muy bien pueden haber sido recibidos en la enseñanza media. Aparte de ello, está claro que los interesados tenían afición a las matemáticas, un nivel elevado de cultura y que, aunque suene a perifrasis, han aplicado su sentido común, el menos común de los sentidos, para las soluciones que han proporcionado.

El valor didáctico que tienen estas aportaciones, tanto por los recursos elementales que han manejado cuanto por la forma de manifestarlos, además de abrir procedimientos originales que se salen de los habituales algoritmos de solución, nos permiten realizar una serie de consideraciones semióticas, útiles para la docencia.

Para ir entrando en materia, voy a salirme excepcionalmente del ámbito médico para exponer el caso de un estudiante de diez años que, en los inicios de la década de los cuarenta, solucionó satisfactoriamente un problema que creo será conocido de la mayoría de mis lectores y que nos sirve de excelente introducción al resto de las situaciones que expondremos.

## 2. El problema de las gallinas y de los conejos

A un grupo de muchachos, que habían superado el entonces examen de ingreso en el bachillerato, se les propuso (juntamente con otras pruebas) el siguiente problema, con la idea de otorgar las posibles matrículas de honor.

*En un corral hay gallinas y conejos, con un total de 85 cabezas y 240 patas. ¿Cuántos animales de cada clase hay?*

Las cantidades apuntadas no creo que correspondan a las que en aquel examen se propusieron, pero ello no quita fuerza al razonamiento que sigue. Hay que hacer constar que este tipo de problemas se resuelve ordinariamente mediante el álgebra elemental, asignatura que se impartía en tercero y cuarto cursos de enseñanza media, cuando los alumnos tenían 13 ó más años de edad.

Uno de los muchachos, de nueve o diez años, razonó de la siguiente manera:

*Le quito una pata a cada animal, con lo que me quedan 85 cabezas y 155 patas, pero ahora las gallinas tienen sólo una pata y los conejos tres. Vuelvo a quitar una pata a cada animal, y me quedan 85 cabezas y 70 patas, pero ahora las gallinas no tienen ninguna pata, mientras que cada conejo aún tiene dos patas. Por consiguiente, el número de conejos que hay es igual a 70 dividido por dos, o sea 35 conejos. En consecuencia, el número de gallinas es de 85 menos 35, es decir 50.*

La prueba de que el problema está correctamente resuelto es obvia. Si mal no recuerdo, una de las dos matrículas de honor fue para este estudiante y la otra para el que hizo el mejor ejercicio de redacción, en lengua castellana entonces.

**Comentario.-** Se trata, evidentemente, de lo que llamamos un *experimento mental*. Sólo le faltó a nuestro protagonista añadir a cada animal las dos patas que le había quitado para dejar las cosas como estaban, a satisfacción de las sociedades protectoras, pero ello no le quita mérito ni mucho menos.

Es claro que lo que aplicó el laureado alumno es lo que llamamos el *método de reducción* para resolver sistemas de ecuaciones lineales, en este caso dos ecuaciones con otras tantas incógnitas. Tres años más tarde, el mismo muchacho hubiera planteado este sistema en la consabida forma:

Sea  $x$  el número de conejos, y sea  $y$  el de gallinas. Podemos escribir ahora:

$$\begin{aligned}x + y &= 85, \\4x + 2y &= 240.\end{aligned}$$

Si ahora multiplicamos por dos ambos miembros de la primera ecuación, tenemos:

$$2x + 2y = 170.$$

Y restando esta última ecuación de la segunda, eliminamos la incógnita  $y$ :

$$2x = 70,$$

lo que implica que  $x = 35$ , y automáticamente  $y = 50$ . Solución acertada de fácil comprobación.

Es obligada ahora una reflexión para el docente: a veces nos aferramos de manera excesiva a determinados algoritmos, olvidando echar mano de nuestro *sentido común*. Esto sucede, sobre todo, cuando manejamos recursos informáticos para resolver cuestiones de estadística, y también cuando incurrimos en lo que se denominan *falsas heurísticas*. ¿No será más propio de una carrera universitaria aprender a manejar el razonamiento además de saber manejar ordenadores? Ciertamente que ambas cosas son complementarias a nuestro juicio.

### 3. La alumna del instituto

Una alumna quinceañera, en los últimos cursos de la enseñanza secundaria, en Zaragoza, consultó con su abuelo, médico mayor ya, sobre un problema que le habían puesto como lección de casa y que tenía que llevar solucionado al día siguiente. Este problema, un clásico del cálculo de probabilidades, que hemos visto reproducido en varios textos en diversas versiones, venía a decir así:

*Un señor soltero y muy amante de las plantas, que vivía en un chalet con jardín tenía un precioso rosal y vivía allí también un anciano jardinero. El rosal era muy delicado, ya que si se le regaba a diario su probabilidad de prosperar era de  $1/2$ , pero si no se le regaba esa probabilidad quedaba reducida a  $1/4$ . El jardinero tenía mala memoria, ya que se olvidaba cumplimentar dos encargos de cada tres que recibía.*

*En cierta ocasión, el señor tuvo que hacer un viaje de negocios de un mes, y encargó al jardinero que regase el rosal. Cuando volvió de su viaje, se encontró con que el arbusto estaba seco. ¿Qué probabilidad hay de que el jardinero se hubiera olvidado de regarlo?*

No es ahora el momento de discutir si se le había enseñado a la alumna el Teorema de Bayes, que permite una fácil solución del problema propuesto. Lo que creemos improbable

es que el abuelo conociese tal teorema. El caso es que éste se fue a la cama dándole vueltas a su cabeza, y que a la mañana siguiente presentó a su nieta una solución que podemos calificar como la *cuenta de la vieja*, llena de buen discurrir y de sentido común. Hela aquí.

A la larga, de cada seis veces que el jardinero recibiera el encargo de regar la planta, la regaría tan sólo dos veces, según el enunciado del problema. De esas dos veces, también *a la larga*, una vez se secaría el rosal. De las cuatro veces que no lo regara, tres acabaría también seco, siempre según el mismo enunciado.

Luego, de cada *cuatro* veces que el árbol apareciera seco, *tres* sería por no haberlo regado, y una a pesar de haberlo regado. Por consiguiente, la probabilidad pedida era de  $3/4$  o sea del 75 %.

No necesitamos decir aquí que la correcta aplicación del Teorema de Bayes conduce al mismo resultado. ¿Qué nos llama la atención del razonamiento del médico? Ciertamente que varias cosas:

1<sup>a</sup> .- La expresión “a la larga”. ¿Qué idea podría tener el abuelo de la muchacha de las *leyes de los grandes números*? Porque estas leyes es sabido que constituyen un sólido fundamento del cálculo de probabilidades. De todas formas no era este señor una excepción dentro de los médicos, como señalaremos al final.

2<sup>a</sup> .- Ese *seis* que aparece al principio de su razonamiento y al que no encontramos otra explicación que el ser un mínimo común múltiplo de las cantidades que vamos a manejar en este problema, elegido *para que salieran números enteros en las cuentas*, sin duda. A un resultado satisfactorio hubiéramos llegado empleando *doce* en lugar de seis, mediante un razonamiento paralelo.

3<sup>a</sup> .- La *vuelta* que le da al problema para presentarlo desde la perspectiva de la situación de *rosal seco* como base del razonamiento. Esto constituye un reconocimiento implícito de las probabilidades *a priori* y de la *verosimilitud*.

4<sup>a</sup> .- La presentación de la probabilidad final en *tantos por ciento*, cosa usual todavía en los tiempos actuales, y explicable entonces porque las escasas nociones de probabilidades que se enseñaban estaban fundamentadas en la proporcionalidad (regla de tres) y en el empleo de porcentajes. Obsérvese la aproximación de este razonamiento a la clásica fórmula de Laplace.

No llegué a enterarme de la calificación que mereció la nieta del médico al corregirse el problema en el instituto, y lo siento. De haber estado a mi alcance, hubiera mantenido una conversación con el profesor, pero desgraciadamente ya no es posible. Lo que puedo afirmar es que no he encontrado esta manera de enfocar la resolución de este tipo de problemas por *la cuenta de la vieja* en los textos que he consultado. Puede que figure en

alguno de los que no han llegado a mis manos.

#### 4. El problema del cumpleaños

Es éste otro de los clásicos, incluído entre otras obras en el texto de Sixto Ríos “Métodos estadísticos” que se utiliza en el tercer curso de Ciencias Matemáticas en muchas universidades de nuestro país. El enunciado viene a ser éste:

*¿Cuál es el número mínimo de personas que deben asistir a una reunión para que haya una probabilidad mayor de 0.5 de que al menos en dos de ellas coincida el día de su cumpleaños?*

La solución, que podemos ver en “Cálculo de probabilidades - I”, de Víctor Hernández, entre otros libros, hace uso de una fórmula inspirada en la de Stirling:

$$1 - p = \exp\left(\frac{-n(n-1)}{2N}\right),$$

en la que  $p$  es la probabilidad solicitada,  $n$  el número de personas, y  $N$  el número de días del año. De ahí, con los datos del problema, se deduce con facilidad:

$$n = \sqrt{2N \ln(1/(1-p))} = \sqrt{2N \ln 2} = 22,5,$$

resultado que, al obligarnos a redondear, se sitúa en 23 personas.

Un compañero nuestro, médico relativamente joven y aficionado a estos temas, discutió de manera más elemental pero igualmente eficiente. Veamos cómo.

Es suceso *seguro* que uno de los asistentes a la reunión, que vamos a llamar el *asistente número uno*, cumple años algún día del año (de Pero Grullo). La probabilidad de que el *número dos* no los cumpla el mismo día es evidentemente de 364/365, atribuyendo 365 días al año. De la misma manera, la probabilidad de que el cumpleaños del *número tres* no coincida en día con ninguno de los otros dos, es de 363/365, y así sucesivamente.

Ahora bien, estos sucesos que estamos tratando son *independientes*, por lo que su probabilidad conjunta será el producto de las probabilidades individuales, o sea

$$1 - p = \frac{365}{365} \times \frac{364}{365} \times \frac{363}{365} \times \cdots \times \frac{365 - n + 1}{365} \leq 0,5$$

¿Cuándo parar estos productos? Pues, evidentemente, cuando alcancemos un valor menor que 0.5, cosa fácil de ejecutar si vamos utilizando una calculadora. Basta contar después los factores para obtener el resultado de *23 personas*, como es automático comprobar.

También ahora nos llaman la atención algunos hechos:

1º .- El médico, al igual que su colega el del rosal seco, *le ha dado la vuelta* al planteamiento, calculando probabilidades *de no coincidencia*, que resultan ser evidentemente complementarias de la de coincidencia de dos cumpleaños en el mismo día del año. De ahí el  $1 - p$ , y la exigencia de que este  $1 - p \leq 0,5$ .

2º .- El discernimiento de nuestro compañero para etiquetar correctamente como *sucesos independientes* las *no coincidencias* de fecha. A ello, une el conocimiento de que la probabilidad conjunta es el producto de probabilidades. Este conocimiento no es extraordinario en estudiantes universitarios de ciencias de la salud que han cursado estadística, asignatura en la que es sabido que se imparten también nociones de cálculo de probabilidades.

3º .- Si el médico en cuestión hubiera trabajado con probabilidades de coincidencia, se hubiera seguramente *hecho un lío*, y no hubiera llegado a resultados convincentes. Este procedimiento de “dar la vuelta” al problema y aplicarle luego (siempre que sea posible) la regla de la probabilidad conjunta de sucesos independientes, es muy útil para resolver multitud de situaciones en medicina.

4º .- El número de días del año influye poco en el resultado. Con 366 días, tendríamos también la misma probabilidad, contrariamente a lo que hemos oído y leído a algunos matemáticos.

## 5. La distribución de Pascal

Otro de los *clásicos* del cálculo de probabilidades se puede enunciar en su forma general de la siguiente manera:

*En una urna hay n bolas blancas y una bola negra, iguales en todo excepto en el color. Se efectúan a ciegas extracciones de una en una con reposición. ¿Cuál es el número medio de bolas blancas extraídas antes de que aparezca la negra?*

Esta cuestión presenta varios casos similares: número medio de lanzamientos de un dado antes de que aparezca un *seis*; ídem de una moneda antes de que salga *una cara*; ídem de cartas de la baraja antes de *obtener un rey*; etc.

La solución habitual hace uso de la distribución geométrica o de Pascal. Si  $k$  es el número de extracciones con reposición,  $k = 0, 1, 2, \dots$  se demuestra que el valor medio de  $k$  es igual a  $(1 - p)/p$ , siendo  $p$  la probabilidad de sacar la bola negra. En el enunciado original, esta probabilidad es claramente  $1/(n + 1)$ , de donde la media de extracciones antes de bola negra, sería  $n$  como es fácil deducir.

El compañero hizo tres intentos. Primeramente probó con los lanzamientos de moneda, por parecerle más fácil el problema, pero como vulgarmente se dice *se hizo un lío* y no

llegó a una solución. Después imaginó un dado y acertó la solución correcta. En un tercer paso, trató de generalizar la situación. Nos interesa ahora, sobre todo, el razonamiento seguido con el dado.

Si el número de lanzamientos del dado, suponiéndolo no trucado, es lo suficientemente grande, o sea que *tiende a infinito*, designando por  $N$  este número de lanzamientos, el número  $n$  de seises que obtendríamos es  $n = N/6$ . Ante cada uno de los *seises* obtenidos habría  $k$  lanzamientos con un resultado de “no seis”, pudiendo variar  $k$  entre cero y un número posiblemente muy grande, pero la media aritmética de  $k$  sería ciertamente igual a 5 *a la larga*, expresión que ya hemos encontrado antes.

La generalización no ofrece dificultades. Si en la urna hay  $n$  bolas, incluída una negra (y el resto, blancas), el número medio de extracciones a ciegas con reposición antes de sacar la negra sería de  $n - 1$  bolas blancas. Si hay  $n + 1$  bolas, incluída una negra, es decir en las condiciones del enunciado, el número medio de extracciones antes de sacar la bola negra sería de  $n + 1 - 1 = n$ .

Este proceder es válido en todo caso. Ya lo hemos aplicado al dado, pero en el caso de la moneda es evidente que  $k = 1$ , o dicho de otra manera, a la larga habría tantas *caras* como *cruces*, lo cual es totalmente plausible. Lo que ya no podemos afirmar es si nuestro protagonista conocía la distribución de Pascal y la expresión de su media, ya que en el razonamiento seguido no la había nombrado siquiera.

Cabe preguntarse si estos temas que hemos comentado hasta aquí salen alguna vez en la práctica de la medicina y ciencias afines. En general, podemos decir que no, pero tampoco salen problemas de *probabilidad geométrica* que son los que vamos a tratar en lo que sigue. Lo cierto es que todos ellos se proponen como ejercicio en los textos a disposición de los médicos, y no digamos de las clases que éstos reciben, con mucha frecuencia impartidas por profesionales de las matemáticas.

En todo caso son buenos para discurrir y ayudan a captar los conceptos que posteriormente habrán de ser de aplicación en ciencias de la salud. No son escasos ciertamente los médicos aficionados a estas cuestiones, así como a algunos de los problemas que se proponen en la probabilidad geométrica, en los que han dado pruebas de indudable acierto como veremos. Habría que añadir que varios de ellos han recibido cursos complementarios de matemáticas, por lo común ofertados por la UNED.

## 6. La Probabilidad Geométrica

En sesiones de seminarios y talleres de estadística se proponen a veces cuestiones en relación con la llamada *Probabilidad Geométrica*. El hecho de que este tipo de temas tenga

más interés para estudiantes de matemáticas, no deja de tener su importancia a la hora de estimular el discurrir de personas que se enfrentan a problemas de estadística. De hecho los vemos en textos, clases y actividades docentes dedicados a estudiantes y profesionales de ciencias de la salud.

La probabilidad geométrica tiene un carácter más abstracto que la ordinaria, debido al hecho de que los espacios en que se desenvuelve están regidos por leyes formales propias. Los subespacios suelen ser infinitos en cuanto a las unidades que los integran, puntos por ejemplo, cuyo conjunto es no numerable. De aquí que, por ejemplo, un pequeño segmento de una recta de longitud infinita tenga *tantos puntos* como la totalidad de dicha recta, lo cual hace que el punto no sea una unidad adecuada para la medida en este caso. Aun más, el número de puntos del radio de una circunferencia es del mismo cardinal que el de puntos del círculo correspondiente.

De aquí se deducen algunas consecuencias, válidas también en ciencias de la salud. Una de ellas es que la intuición nos puede engañar si la aplicamos de forma irreflexiva a la solución de problemas en este campo, de aquí que se originen heurísticas, muchas de ellas falsas. Comparando esto a un vuelo en avión, no cabe duda de que juegan un papel más importante los instrumentos que la vista del piloto, sin olvidar el imprescindible papel de ésta a la hora de tomar decisiones vitales.

Otra peculiaridad es que ha habido ocasiones en que el discurrir de los médicos no ha sido totalmente autosuficiente, en el sentido de que a veces ha sido preciso proporcionarles algún tipo de ayuda, como veremos en los comentarios que siguen. Esto no quita para que los razonamientos expuestos tengan un gran interés didáctico. Siempre hay que contar también con la afición de nuestros protagonistas a las ciencias matemáticas, sin la cual no serían posibles los resultados que vamos a ver.

Expondremos unos casos reales de entre los pocos que en estos años hemos podido recoger. Todos ellos proceden de clases o de sesiones de estadística (y cálculo de probabilidades) a profesionales (no a estudiantes) de ciencias de la salud.

### 6.1. *El segmento trisecado al azar*

Es conocido el problema que ahora presentamos: *Si dividimos en tres partes un segmento de recta, mediante dos puntos situados al azar sobre él, ¿Qué probabilidad hay de que se pueda formar un triángulo con los tres segmentos resultantes?*

Es sabida la condición para que tres segmentos,  $a, b, c$  puedan formar un triángulo:  $a < b + c, b < a + c, c < a + b$ .



Figura 1.—

Este problema se suele resolver echando mano de la probabilidad condicionada, pero en la ocasión que estamos comentando se resolvió por simple razonamiento. Intentaremos reproducir la argumentación del médico.

Sea **M** el punto que marca la mitad del segmento **AB**. (Ver figura 1). Al elegir al azar los dos puntos que han de producir los tres segmentos, pueden darse dos posibilidades:

- a) Ambos puntos “caen”<sup>1</sup> sobre la misma mitad. Entonces, evidentemente, no hay posibilidad de formar triángulo, ya que uno de los subsegmentos es más largo que la mitad del segmento AB. La probabilidad de que, al azar, ambos puntos corten la misma mitad de AB es claramente 0.5
- b) Ambos puntos “caen” en mitades diferentes. En este caso, la probabilidad de que se produzca este evento es también 0.5, pero aquí hemos de distinguir otras dos subposibilidades:
  - b.1) La distancia entre los dos puntos de corte es mayor que  $AB / 2$ . En este caso, por la misma razón que en a), no se puede formar triángulo. Probabilidad de este hecho = 0.25
  - b.2) Esa misma distancia es menor que  $AB / 2$ . La probabilidad en este caso es también 0.25. Únicamente en este supuesto, se puede formar triángulo.

Dado que estas tres posibilidades, a), b.1), b.2), son mutuamente incompatibles, la probabilidad de no poder formar triángulo es igual a  $a) + b.1) = 0.5 + 0.25 = 0.75$ , por lo que la probabilidad de formar triángulo es, por tanto igual a la de b.2) = 0.25

El razonamiento “hay que saberlo ver”, pero es impecable. La persona que resolvió este problema dio la solución correcta a otros dos, como comentaremos. Surgen ahora unas consideraciones de indudable interés:

1. Tanto todo el segmento AB como cualquiera de sus partes, por ínfimas que sean, tienen el mismo cardinal en cuanto a puntos. Hablando vulgarmente tienen el mismo número (no numerable) de puntos, una medida que podríamos utilizar en este supuesto sería la longitud de los subsegmentos que consideremos. Lo del corte en determinados puntos al azar tiene valor conceptual.
2. La probabilidad de que uno cualquiera de los cortes coincida con el punto M es igual a cero, por lo que no tiene sentido el empleo de signos como el  $\leq$  o el  $\geq$  para

---

<sup>1</sup>El médico emplea la palabra *caen*, en lugar de “se encuentran” u otra equivalente.

establecer las relaciones entre uno de los lados del posible triángulo y la suma de los otros dos lados.

3. No obstante las consideraciones antedichas, tiene sentido decir que la distribución de los puntos elegidos al azar sobre el segmento B es una distribución uniforme, en la que por definición todos los puntos del segmento AB tienen la misma probabilidad de ser “elegidos”. ¡Probabilidad cero!
4. La distribución uniforme, que como es sabido nos sirve para generar toda clase de números y distribuciones aleatorias (simulación, etc), posee por decirlo de alguna manera propiedades de oro en cuanto a equiprobabilidad se refiere. También lo comprobaremos en otro de los casos que hemos de comentar.
5. No olvidemos que, si consideramos la línea recta como un conjunto no numerable de puntos, equipotente a cada segmento contenido en ella, estamos tratando con una situación igual (homeomorfa) a la de la llamada recta real. Incluso la propia probabilidad, de la que tanto hablamos, es también por definición un número real, contenido en el intervalo cerrado  $[0, 1]$

## 6.2. Triángulos inscritos en una circunferencia

Aunque no es, ni mucho menos, igual que el anterior, presentamos un problema muy similar. De hecho, fue resuelto por el mismo médico. Su enunciado es muy simple.

*Se señalan, al azar, tres puntos sobre una circunferencia. ¿Qué probabilidad hay de que el triángulo así formado sea obtusángulo?*

Sea la Figura 2. Fijamos sobre la circunferencia un punto cualquiera, A, por ejemplo. Por este punto trazamos el diámetro AM, que contiene al centro O. Siguiendo un razonamiento análogo al del problema anterior, podemos enunciar respecto de los otros dos puntos, B y C, las siguientes posibilidades:

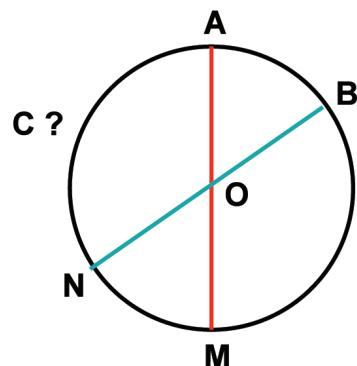


Figura 2.—

- a) B y C “caen” en la misma semicircunferencia. En este caso el triángulo ABC es obtusángulo.
- b) Si lo anterior no sucede, pueden darse a su vez otras dos posibilidades:

- b.1) La “distancia” que separa B y C es mayor de 180 grados, en cuyo caso el triángulo formado es también obtusángulo.
- b.2) Esta “distancia” es menor de 180 grados, lo que traduce que no hay ningún ángulo inscrito en la circunferencia cuya medida sea superior a 180 grados, o sea que el triángulo es acutángulo (no obtusángulo).

Asignemos ahora probabilidades a estos sucesos mutuamente excluyentes:

$$P(a) = 0,5, \quad P(b1) = 0,25, \quad P(b2) = 0,25,$$

de donde  $P(\text{obtusángulo}) = P(a) + P(b1) = 0,5 + 0,25 = 0,75$ .

Observación.- Hemos presentado este caso similar al anterior, pero no igual. En efecto, aquí podemos considerar al punto A como punto de corte, y “estirando” después la circunferencia la transformaríamos en un segmento de recta sobre el que sería válida hasta cierto punto la argumentación anterior. En otras palabras, no podemos hablar de una verdadera homotopía, no siendo por consiguiente “superponibles” ambos casos.

### 6.3. La aguja de Buffon

Este problema es otro de los “grandes clásicos” del cálculo de probabilidades. Podemos enunciarlo de la siguiente manera:

*Disponemos de un conjunto de líneas paralelas separadas por la misma distancia d. Sobre ellas se arroja, al azar, una aguja de longitud a. ¿Qué probabilidad hay de que corte a alguna línea?*

Vemos en la Figura 3 una disposición útil de las líneas paralelas y de la aguja, ésta en dos posiciones diferentes, en una de las cuales no corta a ninguna línea y en la otra sí. Se especifica también la distancia  $d$  entre las paralelas, todas ellas equidistantes entre sí dos a dos.

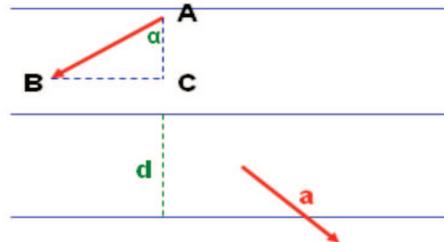


Figura 3.—

Una de las soluciones usuales, para la que precisa considerar un espacio producto, se puede ver en el texto de Sixto Ríos<sup>2</sup>. Una fórmula más general obtenida haciendo  $x = a/d$ , si  $a > d$ , es la siguiente:

$$P(x) = \frac{2}{\pi} \left( x - \sqrt{x^2 - 1} + \sec^{-1} x \right).$$

<sup>2</sup>Sixto Ríos. Métodos Estadísticos. 2<sup>a</sup> edición. Página 140. Ediciones Del Castillo. Madrid. 1985.

El razonamiento seguido por el médico de turno fue en este caso el siguiente:

La probabilidad  $P$  estará en razón directa de la longitud  $a$  de la aguja, y en razón inversa de la distancia  $d$  entre paralelas. Podemos escribir:  $P = ka/d$  donde  $k$  es una constante de proporcionalidad, que hay que determinar.

Para ello consideramos el triángulo rectángulo  $ABC$ , donde se cumple, en virtud de conocimientos elementales, que  $AC = AB \operatorname{sen} \alpha = a \operatorname{sen} \alpha$ , donde  $\alpha$  puede tomar cualquier valor angular. Ahora es cuando el médico necesitó ayuda. ¿Cuál es el valor medio de  $\operatorname{sen} \alpha$  entre  $0$  y  $\pi/2$  radianes o en cualquier intervalo múltiplo del anterior? Este valor es  $2/\pi$ , con lo que la respuesta definitiva es

$$P = \frac{2}{\pi} \frac{a}{d},$$

que puede comprobarse que coincide totalmente con la que vemos en Sixto Ríos. Hay que hacer notar que la intuición del médico no fue pequeña por cierto, y que la buena parte de heurística que empleó estuvo acertada. En su honor diré que, si bien hubo que decirle cuál era el valor medio de  $\operatorname{sen} \alpha$ , él mismo pensó que no era el seno de  $\pi/4$  radianes, o sea de 45 grados, ángulo “media” entre los 0 y los 90 grados, ya que la función *seno*, si bien es continua, no varía de manera uniforme.

Ésta, como hemos señalado, no es de todas formas una solución general del problema de la *aguja de Buffon*, pero entrar en dicha cuestión, además de apartarnos de los fines de estas líneas, no procedería ya que no hemos encontrado ningún profesional de ciencias de la salud interesado en ella.

#### 6.4. *La cuerda mayor que el radio*

Éste es un tema que permite “atisbar” la paradoja de Bertrand, de la que tendremos que hablar por haber sido tratada por médicos, al menos en parte. De hecho la discusión de la paradoja fue iniciada a partir de este problema.

*Se traza al azar una cuerda sobre una circunferencia. ¿Qué probabilidad hay de que su longitud sea mayor que el radio de la misma?*

Existen varias construcciones para la búsqueda de una solución, pero aquí seguiremos el discurrir del facultativo que trató de darle una respuesta, el mismo a quien antes hicimos referencia.

Elegimos sobre la circunferencia un punto cualquiera, A, y trazamos por él la tangente AT. Después, con vértice en A y sobre la línea AT, vamos construyendo ángulos al azar, que irán desde el ángulo de medida cero hasta el de 90 grados. Este último es TAD, cuyos lados son la misma tangente AT y el diámetro AD. (Figura 4).

Como el lado del hexágono AB es igual al radio, y en este caso el ángulo TAB mide 30 grados, cualquier ángulo mayor, por ejemplo el TAC, dará lugar a una cuerda mayor que el radio. Dado que, evidentemente, el arco ABCD mide 180 grados y el arco AOB mide 60 grados, la probabilidad de que la longitud de una cuerda trazada al azar sea mayor que la del radio es igual a  $(180 - 60) / 180$ , o sea  $2/3$ . Igual resultado se obtiene considerando que TAD mide 90 grados y TAB mide 30 grados.

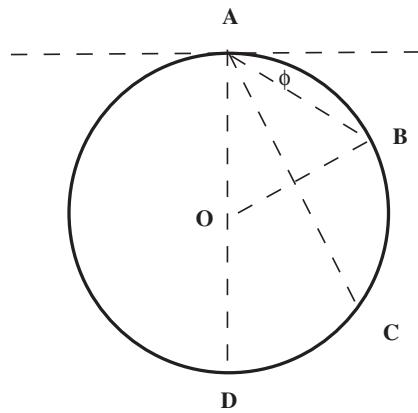


Figura 4.—

Hasta aquí podremos estar o no de acuerdo con el razonamiento expuesto, pero el mismo médico nos va a sacar de dudas, ya que no quedó muy convencido del resultado que había obtenido. Según él recapacitaba, para igualar la longitud del radio había bastando un ángulo  $\gamma$  de 30 grados, con lo que el arco construido abarcaba el tercio de la semicircunferencia. Para duplicar la longitud de la cuerda eran precisos 60 grados más, o sea el triple. El “reparto” de longitudes de la cuerda no “era proporcional” para él, lo que ponía en duda el resultado, juzgándolo fruto de una heurística errónea.

En este punto se le proporcionó parte de la ayuda que necesitó. Se le indicó, y lo comprendió en seguida puesto que recordó pronto sus estudios de enseñanza media, que, procediendo así, la longitud de la cuerda es igual a la del diámetro multiplicada por el seno del ángulo de giro? Por tanto, la distribución de la longitud de la cuerda no es uniforme, ya que sigue un grafico sinusoidal, o sea que no es lineal, vulnerando de esta forma el principio de uniformidad y equiprobabilidad antes establecida.

Se le sugirió otro enfoque del tema que salvaba este inconveniente: ya que la longitud de la cuerda viene únicamente determinada por su distancia al centro, distancia que dicho sea de paso tampoco es lineal, pero que puede construirse sobre el radio perpendicular a la cuerda, elegimos este punto al azar **sobre el radio** mencionado, quedando garantizada de esta manera la distribución uniforme.

El cálculo del *punto de corte* que separa las cuerdas menores que el radio de las mayores, es el que corresponde a la cuerda igual al radio. Con la ayuda de la figura 5, podemos comprobar que este punto M corresponde al segmento OM cuya longitud es igual a  $\sqrt{3}/2 = 0,866\dots$ , suponiendo el radio unidad.

En efecto, supongamos que la longitud de la cuerda AB es igual a la del radio. Las cuerdas perpendiculares al radio OC situadas por encima serán de menor longitud y las situadas por debajo tendrán una longitud mayor que el radio. De la consideración de que en el triángulo rectángulo AMO el lado AO es igual al radio y el AM es la mitad del radio, suponiendo como decíamos un radio unidad, la Figura 5 longitud del lado OM es la que acabamos de apuntar arriba. De ahí se deduce que la probabilidad pedida es 0.8666..., y no la que habíamos hallado primeramente.

El médico aún quedó más satisfecho cuando se le informó sobre la llamada *Paradoja de Bertrand*, que en realidad no es otra cosa que lo que acabamos de comprobar: soluciones diferentes a un mismo problema, al parecer obtenidas con razonamientos correctos, cosa que no es así como hemos podido ver.

## 7. La paradoja de Bertrand

Fueron varios los médicos interesados en este tema, a los que se sumaron otros profesionales: un biofísico, una psicóloga y un biólogo. El verdadero enunciado del problema que dio lugar a la paradoja es el siguiente.

*Si se traza completamente al azar una cuerda sobre una circunferencia, ¿qué probabilidad hay de que su longitud sea mayor que la del lado del triángulo equilátero inscrito en la misma circunferencia?*

En la Figura 6 puede verse el triángulo equilátero inscrito en la circunferencia. Es fácil comprobar que el radio OR perpendicular a uno de los lados, BC, queda dividido por éste en dos partes iguales OM y MR. El lado del triángulo resulta pues ser tangente a la circunferencia de radio mitad. Todas las cuerdas que corten a esta circunferencia serán de mayor longitud que el lado del triángulo, y las que no la corten serán menores.

Se han presentado tres soluciones a este problema,

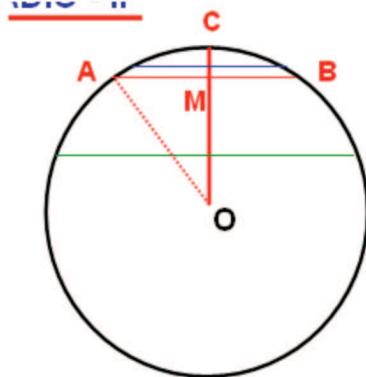


Figura 5.—

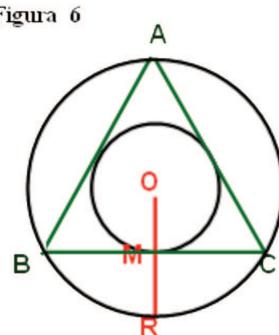


Figura 6.—

que conducen a resultados diferentes, que evidentemente no pueden ser ciertos todos ellos. Sin entrar en detalles innecesarios, las enumeraremos brevemente.

1<sup>a</sup> .– Elegir un punto cualquiera en la circunferencia y actuar como en el caso anterior. Ello da lugar a una probabilidad igual a  $1/3$ .

2<sup>a</sup> .– Elegir un punto al azar sobre el radio. Procediendo como antes hemos visto, obtenemos una probabilidad igual a  $1/2$ .

3<sup>a</sup> .– Elegir un punto al azar dentro del círculo y trazar la cuerda que sea perpendicular al radio que pasa por ese punto. Dado que el área dentro del círculo total es cuádruple que la del círculo de radio mitad, la probabilidad resulta ser  $1/4$ .

¿Con cuál nos quedamos? Antes de exponer los razonamientos de nuestros facultativos, debemos decir que este problema parece definitivamente resuelto por Jaynes<sup>3</sup>, quien demuestra que la solución número 2 es la correcta, lo cual coincide con lo que en el apartado anterior exponíamos.

¿Cuál fue la opinión de nuestros profesionales? Desde luego la primera solución quedaba rechazada en virtud de lo que señalábamos en el comentario al anterior problema. En cuanto a la tercera, hubo de todo como en breve diremos, pero la mayoría también la rechazaron, ya que la elección de ese punto “al azar” daba clara preferencia al área exterior al círculo pequeño, nada menos que de  $3/4$  sobre  $1$ , lo cual a la luz de la crítica médica era trabajar sobre datos sesgados de antemano. Aunque el razonamiento no peca de exceso de lógica matemática, no deja de ser estimable.

La cosa hubiera terminado aquí si no fuera porque uno de los presentes, que había hecho con provecho un curso por correspondencia de estadística y probabilidades en la UNED, nos planteó *en defensa* de las áreas lo que llamó *utilidad* de las mismas para resolver casos de probabilidad geométrica, aportando un ejemplo tomado del curso referido. Dado que su razonamiento no era trivial ni banal, aparte de que su argumentación es ampliamente empleada en este tipo de problemas, creo que debemos dedicar unas líneas a su discusión, en las que se verá que para convencer hay que comenzar por razonar en la medida de lo posible.

### 7.1. Utilidad de las áreas

Consideremos un último problema clásico, que ya se nos presentó con la solución en la mano, cuyo enunciado puede muy bien ser el que a continuación presentamos, ya que del original no pude disponer entonces.

---

<sup>3</sup>Jaynes, E.T. The well-Posed Problem. Found. of Physics. 1973. 3, (477 - 493).

Sea dada la ecuación de segundo grado  $x^2 + bx + c = 0$ , con  $b, c$  incluidos aleatoriamente en el intervalo cerrado  $[0, 1]$ . ¿Qué probabilidad hay en estas condiciones de que las raíces de la ecuación sean reales?

El problema era procedente para estudiantes no matemáticos, ya que este tipo de ecuaciones se estudia en la enseñanza media. Sabemos, además, que para que las raíces sean reales el discriminante de esta ecuación,  $b^2 - 4c$ , no puede ser negativo.

En la Figura 7 podemos ver una representación de los datos. La curva en trazo grueso, cuya ecuación es  $y = 2\sqrt{x}$ , se obtiene haciendo  $y = b$ ,  $x = c$ . El cuadrado ABOC representa el intervalo  $[0,1] \times [0,1]$ . Todo punto de este intervalo situado bajo la curva hace negativo el discriminante de la ecuación, la cual sólo tendrá raíces reales para la zona OPBO y raíces complejas para la zona OPACRO. El cálculo de estas áreas es ya una tarea automática.

En efecto, podemos ahora escribir:

$$\text{Área } OPR = \int_0^{1/4} 2\sqrt{x} dx = \left[ \frac{4}{3}x^{3/2} \right]_0^{1/4} = \frac{1}{6},$$

y puesto que el área de OCAB es igual a 1, y el área de OBPR es igual a  $1/4$  tenemos:

$$\text{Área } OPR = \frac{1}{4} - \frac{1}{6} = \frac{1}{12}.$$

De aquí que la probabilidad de que sean reales las raíces de la ecuación es igual a  $1/12$ .

Y ahora viene la pregunta: ¿por qué este empleo adecuado de las áreas no sirve en la tercera solución de la paradoja de Bertrand? La respuesta no fue proporcionada por los médicos, aunque caben varias conjeturas que no vamos a comentar. Tan sólo haremos notar lo que en el seminario se apuntó: si, en lugar de emplear coordenadas cartesianas para la elección del punto en dicha opción, se hubieran utilizado coordenadas polares, el problema hubiese quedado reducido a designar aleatoriamente un solo punto sobre el radio polar, lo que nos habría abocado a la segunda solución.

## 7.2. Los caminos del razonar médico

No es cierto que los profesionales de ciencias de la salud tengan aversión a las matemáticas, si bien esto sucede en bastantes casos, pero en modo alguno es aplicable a la

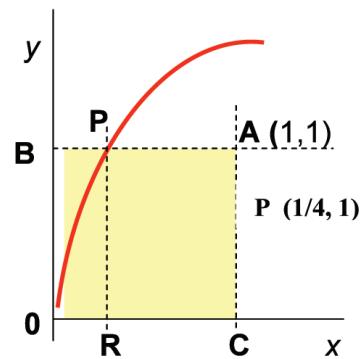


Figura 7.—

generalidad de nuestros colegas. Vamos ahora a referir sumariamente lo sucedido en un seminario de estadística, hace algunos años ya, en el que se comentaban los algoritmos empleados en el análisis de la varianza (de una vía) cuando los ordenadores estaban en sus balbuceos en cuanto a este tipo de aplicaciones.

Sabido es que se consideran en este procedimiento dos tipos de *sumas de cuadrados*: las parciales, de cada uno de los grupos que entran en el análisis, y la total considerando como muestra única el conjunto de todos los datos. La pregunta que se suscitó fue el por qué nunca la suma de las *sumas parciales de cuadrados* era mayor que la *suma de cuadrados total*.  $SCT \geq Suma\ de\ SCP$ .

Para la contestación podíamos ciertamente haber hecho uso de conocidas desigualdades del análisis funcional y de la teoría de la medida, pero ante la necesidad de que fuera comprendido por todos se prefirió seguir un desarrollo elemental en el que no faltase fundamento matemático.

Es de justicia señalar que algunos de los asistentes ya se habían planteado esta pregunta anteriormente, y que en cierto modo la habían resuelto poniendo en juego dos recursos que no carecen de ingenio: los contraejemplos y la convicción. En cuanto al primero no habían hallado ningún caso que contradijera (y, por tanto, invalidara) la desigualdad de arriba. Respecto del segundo, argumentaban con razón que en las tablas de Fisher-Snédecor no había números negativos. Faltaba sólo una demostración directa.

Esta demostración se les facilitó, a petición propia, en cinco pasos, clásicos en los teoremas de matemáticas:<sup>4</sup>

1 - Axiomática. Por ejemplo: el cuadrado de un número real no es nunca negativo.

2 - Demostración de un lema:

$$\frac{(a+b)^2}{(m+n)} \leq \frac{a^2}{m} + \frac{b^2}{n}.$$

3 - Proposición. Aplicación al caso de dos grupos en el análisis de la varianza.

4 - Teorema. Generalizando la proposición a  $k$  grupos.

5 - Corolarios. En este caso fueron la deducción de la fórmula de la suma de cuadrados factorial para el caso de dos subgrupos:

$$SCF = \frac{(\bar{x}_1 - \bar{x}_2)^2}{n_1^{-1} + n_2^{-1}}$$

y la comprobación de que  $t_{g.l=n} = \sqrt{F_{g.l=1,n}}$ , identidad muy conocida en estadística, siendo comprendida la explicación por la totalidad de los asistentes.

La duda que nos queda, imposible de resolver por razones obvias, es si actualmente, en

---

<sup>4</sup>Andériz, M. Didáctica de la Estadística a Profesionales de Ciencias de la Salud. Tesis Doctoral. 2005.

plena era del uso de la informática para estos menesteres, se hubieran planteado nuestros alumnos esa misma cuestión, así como el interés por resolverla.

## 8. Los médicos y las Leyes de los Grandes Números

Terminaremos esta exposición comentando las respuestas obtenidas a partir de un cuestionario de 60 ítems, de los que 16 eran ilustrativos y 44 activos, y que contestaron 129 médicos. Nos vamos aquí a limitar tan sólo a dos preguntas, intuitivas y “abstractas”, sobre la cuestión de los *grandes números* y en las que sorprende la relativamente elevada proporción de aciertos. Había que optar por la respuesta más conforme a los conocimientos del actuante.

28.- Suponemos *infinitos* lanzamientos de un dado no trucado. ¿Cuál es la probabilidad que hay de obtener *en algún momento* una racha de 50 seises seguidos?

- a) 0,      b)  $1/50$ ,      c)  $6/50$ ,      d)  $1/2$ ,      e) 1.

31.- ¿*Cuántas veces* hay que lanzar una moneda normal para tener la **seguridad absoluta** de obtener *al menos una cara*?

- a) 2 veces,    b)  $24 = 16$  veces,    c)  $210 = 1024$  veces,    d) infinitas veces,    e) ninguna es cierta.

Es claro que la contestación correcta al primero de estos ítems es la opción **e**), y al segundo la opción **d**). He aquí los resultados.

**Resultados:** (Sobre los 44 ítems) % global de aciertos = 16. 91    íd actual = 25.6

Preg. 28    15 aciertos    12. 2 % de aciertos

Preg. 31    48 aciertos    39. 0 % de aciertos

El porcentaje global se refiere a la totalidad del cuestionario, el actual a las dos preguntas que aparecen arriba. Resulta un tanto pintoresco que en la primera de estas cuestiones la opción *más votada* fue la a), cuando la probabilidad *casi seguro* de obtener *en algún momento* de una serie infinita una racha de 50 seises seguidos es igual a uno. Aquí falla la heurística fácil. No sucede lo mismo en la segunda pregunta, en la que para los no matemáticos juegan un papel importante la intuición y el concepto de lo abstracto. Este “olfato” de las leyes de los grandes números lo hemos detectado bastantes veces. Recordemos las expresiones “a la larga” que hemos visto en estas líneas, y que suponen cierto nivel cultural y una dosis apreciable de *sentido común*.

Da lugar a no pocas reflexiones el hecho de que, estadísticamente, se pudo probar que quienes más respuestas correctas dieron a la totalidad del cuestionario reunían varias de las siguientes características:

1. Terminación de la carrera hace cinco años o menos.

2. Haber publicado más de tres artículos científicos.
3. Dedicar una hora al día o más al uso del ordenador.
4. Conocimientos de cierto nivel de lengua inglesa.
5. Afición manifestada a las matemáticas.

Los comentarios que esto pudiera suscitar no creo que interesen en este momento, pero todos ellos más o menos admiten razones lógicas en el contexto de la organización actual de la enseñanza de la medicina y de la estadística.

## 9. Epílogo

Antes de finalizar nuestra exposición consideramos obligado exponer unas breves consideraciones.

1 — La cronología en que hemos ido captando lo aquí expuesto no coincide evidentemente con el orden que hemos seguido. Aún nos quedan por comentar no más de tres o cuatro problemas de cálculo de probabilidades resueltos por profesionales de ciencias de la salud, pero creemos que ya es suficiente con este muestrario.

2 — Como habrá observado el lector, la mayoría de los casos que hemos expuesto no fueron apercibidos en el momento de producirse, en otras palabras: “no caímos en la cuenta entonces”, hecho explicable dada la rareza de los mismos, cuyo promedio ha sido alrededor de un caso cada dos años y medio, con una dispersión muy acusada.

3 — El hecho de que las soluciones que hemos ofrecido hayan sido elaboradas por médicos en su casi totalidad, no supone en modo alguno que en otras profesiones no se hayan dado casos similares, inclinándonos a suponer que se han producido en casi todas las careras universitarias en mayor o menor medida. Lo cierto es que el marco de nuestro estudio ha comprendido a los médicos sobre todo.

4 — Hemos pretendido, como anunciábamos al principio, asimilar la mentalidad e incluso el lenguaje de los protagonistas de nuestros relatos. Es evidente que el matemático que esto lea hallará defectos de forma, pero también es cierto que al docente interesado se le ofrece una buena ocasión para analizar las respuestas bajo el punto de vista de la semiótica y para detectar nuevos recursos didácticos para la enseñanza de estas materias a nuestros profesionales y estudiantes.

5 — Es verdaderamente difícil trazar una frontera nítida que “separe” los conocimientos del médico, o del profesional de ciencias de la salud, de los del matemático. Incluso dentro del ámbito en que nos hemos desenvuelto en esta exposición. Pese a que ambos

tipos de estudios son absolutamente diferentes, en modo alguno pueden considerarse disjuntos, habiendo puntos conceptuales y epistemológicos comunes, que indudablemente es útil conocer.

# Formalizing Antinomical Terms and Predicates

F. G. Asenjo

Department of Mathematics

University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15260, USA

## 1 Preliminaries

Circularity has been an important and vexing logical subject from the time of the Ancient Greeks on. A distinction has always been made between (i) a circular argument and (ii) a circular definition. An argument, of course, is a proof, a proof being an arrangement of statements in sequence or in a tree pattern following definite rules of deduction. A circular argument is one in which the conclusion of the argument is used as a premise in the proof, a fallacious reasoning to be discarded. A circular definition in turn is one in which the concept **A** is defined in terms of a concept **B**, and then **B** defined in terms of **A**. Most authorities have thought to this day that circular definitions are also to be discarded, although this has proved to be not always possible. Generally, though, the almost universal agreement has been to consider both kinds of circularity as logical defects. An extreme example of such position is that of Sextus Empiricus who claimed that all definitions, circular or not, are useless because they end up in an unavoidable regressus ad infinitum, hence his total scepticism concerning the viability of logic [1].

In this work we are not interested in circularity in general, only in the special case in which circular definitions involve concepts which are opposite to one another, and then, also in the way in which we understand opposite concepts whether we attempt to define them or not. Such close relationship between opposite concepts we can call “antinomical circularity,” “antinomical” because when a concept **A** depends on an opposite concept **B** to be fully intelligible — that is, when the meaning of **B** is an indispensable part of the meaning of **A** — then **A** is inevitably self-contradictory, not in the sense in which a statement such as “I am lying” is self-contradictory because of its being true and false — concepts are neither true or false by themselves — but on account of the meaning of **A** containing contrary meanings without which it would be incomprehensible. The meaning of an antinomical concept is a function of itself and of the meaning of its opposite.

Antinomic concepts are then useful precisely because of their antinomicity. Thus, truth is unintelligible without falsity, and so are categories of thought inseparable from their opposites. Kurt Gödel put it this way: We must admit “the amazing fact that our logical intuitions (i.e. intuitions containing such notions as truth, concept, being, class, etc.) are self-contradictory.[2]”

But what is opposition? It is a primitive idea impossible to define properly just as so many mathematical ideas that occur in axioms and whose meaning — not always unique — gradually develops in the various interpretations such ideas have in the models of the axioms: we come to form an intuition of what a set is by applying the notion — hazy as it is before we use it. Even so, Cantor himself ventured an informal characterization of what a set is by saying that “a set is a multiplicity taken as a unit,” which of course calls for the prior definitions of multiplicity and unit. Regardless, Cantor’s characterization is useful for a purely intuitive first approach. Similarly, we can say that two concepts are opposite if they are semantically contrary to each other, that is, if the meaning of one is clearly placed against the meaning of the other. We do perceive this opposition of two ideas when it is present.

## 2 Antinomic Terms

When we define or merely understand a concept  $\mathbf{A}$  in terms of another concept  $\mathbf{B}$ , and then do the same with  $\mathbf{B}$  in terms of  $\mathbf{A}$ , we have what is commonly called a “vicious circle”. Here we will be especially interested in the case in which  $\mathbf{A}$  and  $\mathbf{B}$  are opposite concepts, one example being when  $\mathbf{B}$  is in some sense a negation of  $\mathbf{A}$ , negation constituting a particular case of opposition. In general, a “vicious circle” occurs when  $\mathbf{A}$  and  $\mathbf{B}$  are inseparable notions each in need of the other for any reasonable understanding. This is a much more common semantic event than what we tend to think, and an inevitable one. Given the pejorative slant with which the expression “vicious circle” is taken as denoting something to be avoided, we shall use alternatively the plain expression “circle” or, when opposition is involved, “antinomic circle” or, more specifically, “antinomic term” or “antinomic predicate” as the case may be. Nevertheless, we shall still use “vicious circle”, but in a definitely positive sense.

Let us characterize an “antinomic circle” as either (i) the conjunction of a term with one or more opposite terms, or (ii) the conjunction of a predicate with one or more opposite predicates. Antinomic circles must be distinguished from antinomic sentences such as “I am lying.” The latter is true and false; antinomic circles are neither true nor false, they are complex linguistic entities to be fed to predicate formulas in the appropriate places. These formulas may then become true, false, true or false, or neither true nor false

according to the semantic context in which they are interpreted. Now, the conjuncts of an antinomic circle are either inseparable opposite terms or inseparable opposite predicates; in each case we are dealing with intertwined concepts forming part of a complex linguistic entity. Opposition is a general case of antinomicity, and with the notion of antinomic circle we bring down antinomicity from the level of predicate formulas to the level of terms and predicates.

Most of the basic categories of thought are inseparable parts of antinomic circles. When we deepen our understanding of one such category, we come to realize that it is unthinkable without its opposite counterparts. Consider for example “one” and its opposite notion “many” in the sense of “more than one”. Since our experience constantly recognizes pluralities, we perceive each “one” as “one of many” a chosen item. Similarly, each “many” is “many ones”: “many” cannot be thought of in any way than as a gathering of “ones.” The two notions depend on one another, they are semantically intertwined into an inseparable complex: “one-and-many”, an antinomic term the meaning of each of whose components is included in the other’s meaning, a conjunction without which neither concept can be comprehended. This semantic situation has been recognized before. The linguist Jost Trier remarked: “Every uttered word reminds us of the one of opposite sense. The value of a word is recognized only if it is bounded against the value of the neighboring and opposing words.[3]”

The inevitable antinomicity of our basic concepts is the force that makes up the semantic field. Charles Bally concurred: “Logical notions exist together in our mind with the opposite concepts, and these oppositions are ready to present themselves to the consciousness of the speaking subject. It can be said that the contrary of an abstract word is part of the sense of the word [4].” Interestingly, Martin Heidegger, an author not always clear, puts the matter in the most explicit way: “If interpretation must operate in that which is understood, how is it to bring any scientific results to maturity without moving in a circle? Yet according to the most elementary rules of logic this circle is a *circulus vitiosus...* But if we sense this circle as a vicious one and look for ways of avoiding it, even if we just sense it as an inevitable imperfection, then the act of understanding has been misunderstood from the ground up... What is decisive is not to get out of the circle but to come into it in the right way. In the circle is hidden a positive possibility of the most primordial kind of knowing [5].” It is not then a question of “tolerating” the vicious circles but that of turning them into efficacious instruments of our understanding.

Another antinomic term is matter-and-energy: energy being characterized by its effects on matter, and matter being concentrated energy lying in wait to be released. Whole-and-part represents another antinomic term whose components are impossible to separate entirely, and so does activity-and-passivity, as well as identity-and-difference, the latter

being of the essence of becoming which is nothing other than the presence of change in what remains identifiably the same. Examples of antinomic predicates would be real-and-potential and universal-and-particular. But more about this in the following section.

### 3 Antinomic Predicates

Predicates will be understood as formalizing either properties (one-place predicates) or relations  $n$ -ary predicates ( $n$  greater than 1). The expression “bittersweet”, a common word easily understood, represents an antinomic unary predicate that is the conjunction of two opposite properties. A situation, a memory, the taste of a food may be bitter and sweet at the same time. Experiencing them together transforms both sweetness and bitterness giving each a new enlarged meaning as each enters into the indivisible complex “bittersweet”.

In set theory, membership becomes an antinomic binary relation when we consider whether or not the set  $\mathbf{T}$  of all sets that are not members of themselves is or is not a member of itself. This leads to Russell’s antinomy, of course, but at the same time it makes of the binary relation of membership an antinomic predicate. Let us make this more precise introducing now symbols to systematize the new situation.

Both terms and predicates can have more than one opposite. For example, the binary predicate “less than” has as opposites “greater than,” “equal to,” and “neither less than nor greater than,” that is, not comparable. In order to represent opposition both for terms and predicates let us use the negation symbol “ $\neg$ ” extending its usual role as only applicable to formulas to being also applicable to terms and predicates, but with a different connotation. Let us look at the specifics. The negation of a statement  $\mathbf{p}$  produces the unique compound statement “not- $\mathbf{p}$ .” Now, if the statement  $\mathbf{p}$  is in opposition with the statement  $\mathbf{q}$ , neither  $\mathbf{p}$  nor  $\mathbf{q}$  are necessarily each the negation of the other, negation of a statement is only a special case of opposition. The symbol “ $\neg$ ” cannot possibly be used then to represent propositional opposition in general. For terms and predicates the situation is reversed.

### 4 Types, Positive and Negative

We shall introduce term formulas in contrast with predicate formulas, terms assuming the role that predicates play in the usual predicate calculus, that is, forming atomic formulas when prefixed to the appropriate number of predicates, the latter playing the role that terms have in the usual predicate calculus. To this purpose, let us frame our logic within a system of types, the positive ones being the usual types of type theory,

which will include all predicate formulas of any type definable in the formal language in case. Type 0 lodges the symbols for terms and predicates by themselves, no formulas. In turn, negative types harbor in type  $-1$  (i) atomic term formulas of the form  $\mathbf{t}(\mathbf{P})$  for example,  $\mathbf{t}$  a term,  $\mathbf{p}$  a predicate, or  $\mathbf{t}(\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_n)$ ,  $\mathbf{t}$  a term of arity  $n$ , and each of the predicates  $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_n$  having the same arity  $k$ ; in addition, (ii) type  $-1$  contains all the compound term formulas obtainable the usual way from the atomic ones using the propositional connectives and quantification over all predicates (we shall not go beyond type  $-1$  here). Negative types of term formulas require of course a different semantics which will be described in this and the next two sections.

The notion of negative types was introduced by Hao Wang [6]. He used this notion only as a device to show the independence of the axiom of infinity in set theory, not to analyze terms. Wang states: “It may be argued that in logic and mathematics there is no reason for us to discuss individuals [7].” In his system of negative types “there are no more individuals, and all types are on an equal footing [8].” In contrast, we are here appealing to negative types precisely to formalize the structure of terms and predicates, and of their respective interpretations. Human thinking begins and ends with individuals; from them abstract properties and relations are abstracted. We claim that despite the power and achievements of abstraction it is a mistake to banish the analysis of individuals altogether from logic and mathematics. The present work is intended to reaffirm this position.

The system of types we are outlining differs from Wang’s in that, for the latter’s approach, in the semantics of all positive and negative types new objects are introduced for each type to form that type’s domains of interpretation. Here, in the semantics of type  $-1$ , the “individuals” of a given domain of interpretation are classes of individuals or of  $k$ -tuples of individuals taken from a previously given domain of interpretation in type 1. Specifically, given that we wish to formalize terms in type  $-1$  as performing a role similar to that of predicates in type 1 with each term being fed one or more predicates in accordance with the arity of the term, each predicate is to be interpreted by the class of individuals or  $k$ -tuples of individuals drawn from one specific domain in type 1, individuals that satisfy the predicate in the semantics of type 1. The principle behind this approach is that, concretely speaking, we can identify each real term as being the sum total of all the predicates the term displays, that is, all the properties that the term exhibits, plus all the relations the term is actually engaged with. In accordance to this principle,  $\mathbf{t}(\mathbf{P})$  in type  $-1$  implies that  $\mathbf{t}(\mathbf{P})$  is the case in type 1, but it also implies that  $\mathbf{t}$  is not an atomic, indivisible entity: no term is closed into itself. Contrary to logical atomism, “atomic” terms have structure, and the predicates that make  $\mathbf{t}(\mathbf{P})$ ,  $\mathbf{t}(\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_n)$  etc., hold are the components of such structure. In addition, properties and relations in type  $-1$  are not unbreakable either, they are made up in turn by components of even lower type, but this

is beyond our scope.

## 5 Domains of Interpretation

In each type, the choice of a domain of interpretation is in principle arbitrary. In the applications however the choice responds of course to a specific purpose. Once chosen, the domain remains fixed to determine the particular interpretation intended. Let us represent by  $\mathbf{D}_1$  a domain from type 1 and by  $\mathbf{D}_{-1}$  a domain from type  $-1$ . The composition of any  $\mathbf{D}_1$  is made up of individuals related to the given purpose of the interpretation. Select distinct members of a  $\mathbf{D}_1$  are assigned one to one to each atomic term, each assigned individual constituting the meaning of the given term in  $\mathbf{D}_1$ . Each  $\mathbf{D}_1$  is in turn and by itself the universe of discourse out of which there are no meaningful entities to talk about. Predicates are assigned each a subset of the set of all individuals of such  $\mathbf{D}_1$ . Then, meaning and satisfiability of formulas — and therefore truth and falsity — are recursively defined as a function of the temporarily fixed domain of interpretation  $\mathbf{D}_1$ , and will vary from domain to domain except for tautologies.

As for any  $\mathbf{D}_{-1}$ , a parallel relativization of meaning as a function of the interpretation takes place. The composition of  $\mathbf{D}_{-1}$  however differs from that of any  $\mathbf{D}_1$ . In accordance with what we stated in the previous section, the interpretation in  $\mathbf{D}_1$  of  $\mathbf{t}$  from  $\mathbf{t}(\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_n)$  for example,  $\mathbf{t}$  and  $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_n$  constant, consists of the class of all classes of  $k$ -tuples of individuals from  $\mathbf{D}_1$  which in type 1 satisfy the constant components  $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_n$  in  $\mathbf{t}(\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_n)$ . Not going here beyond the types 1 and  $-1$ , we can use the same formal symbols  $\mathbf{t}$  and the  $\mathbf{P}_i$ s to represent terms and predicates respectively in both types, but with different interpretations in each type as described. Within negative types no term or predicate can be represented by a point without parts: terms and predicates are not atomic, they have a structure that positive types hide and which negative types disclose. One must resist the subconscious inclination to fall back into thinking of terms and predicates in type  $-1$  the way we do it in type 1. Whereas formal expressions are built and interpreted from the bottom up in positive types, they are constructed, analyzed, and interpreted from the top down in the negative ones.

## 6 The Syntax and Semantics of Term Formulas

The propositional operator of negation “ $\neg$ ”, which applies only to predicate formulas in type 1, will be extended in type  $-1$  to apply to term formulas, opposite terms, and opposite predicates. Thus, the expressions “ $\neg\mathbf{t}$ ” and “ $\neg\mathbf{P}$ ” will indicate respectively a term and a predicate opposite to the term  $\mathbf{t}$  and the predicate  $\mathbf{P}$ . If we need to represent that  $\mathbf{t}$

and  $\mathbf{P}$  have more than one opposite, we shall list them respectively thus  $\neg_1 \mathbf{t}, \neg_2 \mathbf{t}, \dots$ , and  $\neg_1 \mathbf{P}, \neg_2 \mathbf{P}, \dots$ , the terms in  $\neg_1 \mathbf{t}, \neg_2 \mathbf{t}, \dots, \neg_n \mathbf{t}$  and the predicates in  $\neg_1 \mathbf{P}, \neg_2 \mathbf{P}, \dots, \neg_n \mathbf{P}$  intended to represent respectively terms and predicates pairwise opposite to each other.

“ $\neg \mathbf{t}(\mathbf{P})$ ” can be satisfied, not satisfied, or both simultaneously in a given interpretation. With  $\mathbf{t}$  and  $\mathbf{P}$  constant,  $\neg \mathbf{t}(\mathbf{P})$  is satisfied in a domain  $\mathbf{D}_{-1}$  iff the class of individuals that interprets  $\mathbf{P}$  belongs to the class of classes of individuals that interprets  $\neg \mathbf{t}$  in that domain.  $\neg \mathbf{t}(\mathbf{P})$  is satisfied and not satisfied in  $\mathbf{D}_{-1}$  iff the class of individuals that interprets  $\mathbf{P}$  in such domain belongs and does not belong to the class of classes of individuals that interprets  $\neg \mathbf{t}$  in  $\mathbf{D}_{-1}$ . We are assuming, of course, a semantics that allows for antinomies. If  $\mathbf{t}$  is of arity  $n$ , the definition still obtains substituting “classes of  $n$ -tuples of classes of individuals” for “classes of classes of individuals.”

“ $\neg \mathbf{P}$ ” reads “the opposite of  $\mathbf{P}$ ”, and in a given domain  $\mathbf{D}_{-1}$   $\neg \mathbf{P}$  and  $\mathbf{P}$  are respectively interpreted by classes of individuals, classes which may be disjoint, or have a nonempty intersection.

Let us extend now the connective “&” (and), used for the conjunction of predicate formulas, to the conjunction of term formulas, terms, and predicates; this makes of  $\mathbf{t} \ \& \ \neg \mathbf{t}$  and  $\mathbf{P} \ \& \ \neg \mathbf{P}$  formal expressions. As for the meaning, if  $\mathbf{t} \ \& \ \neg \mathbf{t}$  represents the constant term one-and-many, we can interpret the term formula  $(\mathbf{t} \ \& \ \neg \mathbf{t})(\mathbf{P})$  as stating that “the predicate  $\mathbf{P}$  shares both the characteristics of being a unity and a multiplicity.” Similarly,  $\mathbf{P} \ \& \ \neg \mathbf{P}$  can be given the meaning of “bittersweet.”

In mathematics and logic, and even in concrete contexts, the number of opposite terms and predicates relevant to the discourse in case is always limited. The usual opposite of “matter” is “energy,” although “emptiness” could also be pertinent in a given physical discussion. And we already mentioned three opposites to the predicate of “less than.” It is then the domain of discourse, the limited universe of meanings that effectively controls the number and use of the opposites to a term or to a predicate.

As for quantification, the term formula  $\mathbf{t}(\mathbf{P})$  in type  $-1$  is quantified over all predicates in expressions such as  $(\forall \mathbf{P})\mathbf{t}(\mathbf{P})$  and  $(\exists \mathbf{P})\mathbf{t}(\mathbf{P})$ ,  $\mathbf{P}$  variable.

We mentioned that  $\neg \mathbf{t}$  with  $\mathbf{t}$  constant is interpreted by a class of classes of individuals, and of course so is  $\mathbf{t}$ , the interpretation of which is not necessarily the set-theoretic complement of the interpretation of  $\neg \mathbf{t}$  in a given domain  $\mathbf{D}_{-1}$ . Thus,  $(\mathbf{t} \ \& \ \neg \mathbf{t})(\mathbf{P})$  is satisfied iff there is a class of individuals in  $\mathbf{D}_{-1}$  that satisfies  $\mathbf{P}$  that belongs to the intersection of the two classes of classes that satisfy  $\mathbf{t}$  and  $\neg \mathbf{t}$  respectively;  $(\mathbf{t} \ \& \ \neg \mathbf{t})(\mathbf{P})$  can then be true, false, true and false, or neither. Predicates are usually thought of as standing for independent properties or relations; that is, formal objects whose meaning is floating by itself in some heaven of ideas removed from the concreteness of real terms.

But predicates are in actuality first seen as properties of a term, or in the relations the term exhibits. Originally, we do not think of whiteness by itself, we observe that some things are white. Similarly, we see in the term the relations that make up the term, its internal relations with other terms. To describe a term is to peel off in succession all the predicates that the term displays, i.e., to single out one after another the properties and the relations that the term offers. We perform the peeling of predicates from the term the same way we do with the folds of an onion. Then we turn each fold abstractedly into a formal item. The domain of interpretation  $\mathbf{D}_{-1}$  must produce one such “onion” for each constant term  $\mathbf{t}$ , the “onion” being the class of all classes of individuals that satisfy  $\mathbf{P}$  in  $\mathbf{t}(\mathbf{P})$ . If  $\mathbf{t}$  is variable,  $\mathbf{D}_{-1}$  must in turn produce an “onion space,” with each constant assignment for  $\mathbf{t}$  being given a single specific “onion.” The “onion space” is then the class of all classes of classes of individuals such that each predicate or  $n$ -tuple of predicates are associated with one fold of one “onion.”

Although  $\mathbf{t}(\mathbf{P})$  may be false for all  $\mathbf{P}$  in some abstract domain of interpretation, in the real world every existing term— every actual object— has properties, hence  $\mathbf{t}(\mathbf{P})$  is necessarily true for some  $\mathbf{P}$ . To feed an antinomic term such as  $\mathbf{t} \& \neg\mathbf{t}$  to a nonantinomic predicate  $\mathbf{P}$  does not necessarily produce in type 1 an antinomic formula:  $\mathbf{P}(\mathbf{t} \& \neg\mathbf{t})$  can be simply true or simply false. Similarly, to feed an antinomic predicate such as  $\mathbf{P} \& \neg\mathbf{P}$  to a nonantinomic term  $\mathbf{t}$  in type  $-1$  does not make  $\mathbf{t}(\mathbf{P} \& \neg\mathbf{P})$  antinomic, the latter can be simply true or simply false. So may be the case also in type 1 for  $(\mathbf{P} \& \neg\mathbf{P})(\mathbf{t})$  and  $(\mathbf{P} \& \neg_1\mathbf{P} \& \dots \& \neg_k\mathbf{P})(\mathbf{t})$ : for example, let us take the antinomic predicate  $\epsilon \& (\neg\epsilon)$  with  $\epsilon$  being the binary relation of membership; let  $\mathbf{T}$  be the set of all sets that are not members of themselves, then  $(\epsilon \& (\neg\epsilon))(\mathbf{T}, \mathbf{T})$  is simply true, not antinomic.

## 7 A Fuzzy Logic of Opposition

Let us introduce a binary predicate of opposition that will apply (i) to pairs of statements, (ii) to pairs of terms, and (iii) to pairs of predicates. If  $\mathbf{p}$  and  $\mathbf{q}$  represent two statements,  $\text{Opp}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  will be interpreted as saying that “ $\mathbf{p}$  and  $\mathbf{q}$  are opposite statements.” If  $\text{Opp}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  is the case, then it is always the case that  $\text{Opp}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ . In turn,  $\text{Opp}(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2)$  states that the term  $\mathbf{t}_1$  is opposite to the term  $\mathbf{t}_2$ . Similarly,  $\text{Opp}(\mathbf{P}, \mathbf{Q})$  states that the predicate  $\mathbf{P}$  is opposite to the predicate  $\mathbf{Q}$ . If both cases  $\text{Opp}(\mathbf{t}_2, \mathbf{t}_1)$  and  $\text{Opp}(\mathbf{Q}, \mathbf{P})$  follow.

But opposition is only in particular cases absolute. There is a grading of opposition that may apply to the three cases given above. For example, Peter may be the opposite of Mary in that Peter loves Mary but Mary dislikes Peter. If the love is stronger than the dislike, then  $\text{Opp}(\mathbf{P}, \mathbf{M})$  with  $\mathbf{P}$  for Peter and  $\mathbf{M}$  for Mary, has a greater degree than

$\text{Opp}(\mathbf{M}, \mathbf{P})$ . To represent this situation let us attach a real number from the interval  $[0,1]$  to the predicate of opposition in this manner:  $\text{Opp}(\mathbf{P}, \mathbf{M})$  and  $\text{Opp}(\mathbf{M}, \mathbf{P})$ . If  $a = 1$  or  $b = 1$ , the opposition is in each such case total; if  $a = 0$  or  $b = 0$  there is no opposition at all. For any real number between 0 and 1 the opposition is partial, which implies that, to some degree, the opposition is absent as well. In the case of Peter and Mary  $a > b$ . The following expressions  $\text{Opp}_c(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ ,  $\text{Opp}_d(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2)$  and  $\text{Opp}_f(\mathbf{P}, \mathbf{Q})$  will be read respectively “the statement  $\mathbf{p}$  is the opposite of the statement  $\mathbf{q}$  with a degree  $c$ ” “the term  $\mathbf{t}_1$  is the opposite of the term  $\mathbf{t}_2$  with a degree  $d$ ,” and “the predicate  $\mathbf{P}$  is the opposite of the predicate  $\mathbf{Q}$  with a degree  $f$ .” When Mary dislikes Peter only up to a point, there is no complete opposition, then  $0 < b < 1$ . If Peter truly loves Mary but not madly, then  $0 < b < a < 1$ .

To grade the predicate of opposition is tantamount to make the logic of opposition an infinite-valued one. The real number  $a$  represents the truth value of the predicate formulas  $\text{Opp}_a(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ ,  $\text{Opp}_a(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2)$  and  $\text{Opp}_a(\mathbf{P}, \mathbf{Q})$ , with  $a = 1$  corresponding to absolute truth,  $a = 0$  to complete falsity, and  $0 < a < 1$  to a partial degree of truth. From the considerable practical applications of fuzzy set theory and fuzzy logic one can learn how to go from a purely qualitative, subjective estimation of the graded truth values to a more quantitative, objective one. As for the truth value of  $\neg\text{Opp}_a(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ , etc., the simplest assignment would be  $1 - a$ , but there are other ways of dealing with the operation of negation in fuzzy logic [9].

In order to place within fuzzy set theory the graded notion of logical opposition, especially that of antinomic terms and predicates, let us assume an already established set theory in which membership is a graded relation in a way that  $\mathbf{x} \epsilon_a \mathbf{S}$  indicates that for every member of a universe  $\mathbf{U}$  and every subset  $\mathbf{S}$  of  $\mathbf{U}$  the membership of  $\mathbf{x}$  to  $\mathbf{S}$  has a degree attached measured by a real number  $a$  from the interval  $[0, 1]$ . A fuzzy binary relation of opposition “Opp” on a universe  $\mathbf{U}$  is a fuzzy set (a set with fuzzy membership) defined by a well-determined function on the Cartesian product  $\mathbf{U} \times \mathbf{U}$  into the closed interval  $[0, 1]$  for each of the three following cases to consider: (i)  $\mathbf{U}$  is the set of all statements in a given formal language, (ii)  $\mathbf{U}$  is the set of all terms, simple or complex, in that language, (iii)  $\mathbf{U}$  is the set of all predicates, simple or complex, in such language. Then  $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \epsilon_a \text{Opp}$ ,  $(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2) \epsilon_b \text{Opp}$ , and  $(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) \epsilon_c \text{Opp}$ , express each set-theoretically the logical fact that the two components of each pair are in opposition of one another. The numbers  $a, b, c$  measure the strength of the opposition between the components of each pair in one direction, i.e., the corresponding logical degree of truth.

Now, to state that  $(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2) \epsilon_b \text{Opp}$  is partially true and  $b$  is its degree of truth implies that it is also partially false. In other words, unless  $b = 0$  or  $b = 1$ ,  $\text{Opp}_b(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2)$  is necessarily an antinomic expression regardless of whether  $\mathbf{t}_1$  or  $\mathbf{t}_2$  are antinomic terms

or not. What the degree of truth of  $\neg\text{Opp}_b(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2)$  may be would depend not only on the degree of falsity of  $\text{Opp}(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2)$  but also on the kind of fuzzy negation used. As we said, several options for negation are possible. The same can be said of  $\text{Opp}_a(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  and  $\text{Opp}_c(\mathbf{P}, \mathbf{Q})$ . Clearly, the degree of truth of the three kinds of opposition vary each with the given domains of interpretation and their corresponding functions  $\mathbf{U} \times \mathbf{U} \longrightarrow [0, 1]$ . And so it is also with the degree of falsity of each of the three expressions. If  $b$  is the degree of truth of  $\text{Opp}(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2)$  and  $b'$  its degree of falsity, we can represent its degree of antinomicity by the complex number  $b + ib'$ .

## 8 The Reality of Antinomic Terms and Predicates

We identify a term by the properties and relations it holds. If the term is real, so is the meaning of the predication that apply to it. Now, the characteristics of a term usually show themselves in succession; hence, to predicate about a term is to unfold it, and if the term is antinomic, it also implies to disclose one or a sequence of oppositions, hidden in it. In the example of the antinomic term one-and-many concealed underneath the obvious opposition of one and many, there is a second opposition, that of the antinomic pairing of two gerunds into the antinomic circle “gathering-and-choosing,” which prior to one-and-many makes of one-of-many the outcome of a choice, and of many-ones the outcome of a gathering. There is here a vicious circle within a vicious circle. The conjugation of gathering and choosing is part of the conjugation of one and many. This disclosing can often be pursued even further, but let us now move on to a physical example of antinomic term.

The Bose-Einstein Condensate is a different state of matter that has been found to exist at extremely low temperatures. It is a very common state in nature, and is characteristic of certain quantum fluids in such a manner that they are observed to flow without friction, experiencing no viscosity, and therefore capable of passing through one another, occupying the same place in space, and then, although being distinct entities, becoming indistinguishable from one another: they are different individual entities without separate individuality, behaving as one single entity with the same quantum states. In short, they constitute physical antinomic terms. These condensates can rotate and generate vortices that have been compared to small black holes, and whose dynamics has now been studied with amazing mathematical detail, the shape, number, and position of the vortices being a function of the velocity of the rotation [10].

The condensates are just one more example of the many antinomic entities and properties that quantum mechanics is discovering with increasing frequency. Puzzled by the counterintuitive character of such discoveries when considered from our traditional way

of thinking, many scientists claim that, in effect, there is no quantum reality, that what this branch of physics is producing is a succession of theoretical constructions useful for experimentation but which in themselves are not, cannot be a reflection of world reality as it truly is. Yet it has always been the belief of scientists that, subject to subsequent changes and adjustments, science does reveal to us a very good approximation to reality as it is. However, now that quantum mechanics defies our traditional ways of thinking as it is the case with the condensates as well as with the universal phenomenon of nonlocality, then the reality that physics constructs for us nowadays must be denied despite all its verifications. This simply will not do. It is indeed our way of thinking that is in need of adjustment.

Compared to the positive attitude of physicists in pursuing the analysis and experimentation of phenomena which they do not ultimately understand very well, mathematicians in contrast have for the most part displayed a negative attitude toward antinomic entities such as the Russell set, the set of all sets that are not members of themselves. In the eagerness to suppress such entities, these have not really been looked into with the same seriousness that is being devoted to the Bose-Einstein Condensate for example. Yet, it would be interesting to see what recurring circles of membership could be defined in the Russell set, what logical “vortices” could be discovered in its midst.

The Russell set is not the only mathematical antinomic term matching the interest of those of their physical antinomic counterparts. By suspending the axiom of choice the existence of new mathematical objects becomes possible, some of them antinomic, such as the mediate sets. A mediate set is one that (i) is not inductive, i.e., cannot be counted by a terminal sequence of positive integers — in other words, infinite — and (ii) is also not reflexive, i.e., it is not equinumerous to a proper subset of itself — in other words, finite. Mediate sets are antinomic terms: at the same time finite and infinite. It can be proved that if the set of all functions on the cardinal number of the set  $\nu$  into the cardinal number of the set  $\mu$  is mediate, then  $\mu$  or  $\nu$  is mediate. However, the power set of the power set of a nonempty, noninductive, nonreflexive set is reflexive [11]. But if we drop the axiom of choice we must do the same with the continuum hypothesis, since the latter implies the former. This means that the cardinal number of the set of all subsets of a mediate set is not necessarily either an aleph or a beth number. Let us call it a “gimel number,” which can be mediate or nonmediate, and, in the later case, not necessarily an aleph or a beth number. The cardinal number of the set of all subsets of the set of all subsets of a mediate set cannot be a mediate set because it is reflexive. Let us call it a “daleth number,” still not necessarily an aleph or beth number: it could be a yet undefined kind of nonfinite reflexive cardinal. But we can narrow the options introducing a Mediate Continuum Hypothesis to require that every daleth equal a gimel number, i.e.,

that the cardinal number of the power set of the power set of a mediate set be the cardinal number of the power set of some mediate set. Gimel numbers can be antinomic terms, and daleth numbers are obtained from antinomic terms [12].

The objective of the previous remarks is to briefly introduce the reader to a look at domains of mathematical and physical antinomic terms which, far from ending in a rejection of such terms as pathological objects, views them as entities with interest in their own right. No doubt, opposition — and antinomicality in particular — introduce an unsettling element of ambiguity in our lives since it forces us to understand things and situations in more than one way. But ambiguity and fuzziness are of the essence of many real things and situations. True, there are regions where one can count on definiteness, on statements being either simply true or simply false, but there are also vast realms of reality where vagueness and ambiguity are part of the essence of things, not the result of faulty or incomplete information. We must realize this fact and adjust to it.

## References

- [1] Sextus Empiricus, Outlines of Scepticism, edited by J. Annas and J. Barnes, Cambridge: Cambridge University Press, 2000, pp. 123-125.
- [2] K. Gödel, “Russell’s Mathematical Logic,” The Philosophy of Bertrand Russell, ed. by P.A. Shilpp, New York: Tudor, 1944, p. 131.
- [3] H. Geckeler, Semántica Estructural y Teoría del Campo Léxico, Madrid: Gredos, 1976, p.288.
- [4] Ibid., p. 290.
- [5] M. Heidegger, Being and Time, trans. by J. Macquarrie and E. Robinson, London: SCM Press, 1962, pp. 194-195. Underlinings in the original.
- [6] H. Wang, Logic, Computers, and Sets, New York: Chelsea Publ. Co., 1970.
- [7] Ibid., p. 411.
- [8] Ibid., p. 411.
- [9] See for example the section on “Fuzzy Complements” in G.J. Klir and B. Yuan, “Fuzzy Sets and Fuzzy Logic”, Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 1995.
- [10] The literature on the Bose-Einstein Condensates is now very extensive and growing. For a detailed analysis of the intricate subject of vortices in particular see for example A. Aftalion, Vortices in Bose-Einstein Condensates, New York: Birkhäuser, 2006.
- [11] A.N. Whitehead and B. Russell, Principia Mathematica, Cambridge: Cambridge University Press, 1927, Vol. II, p. 280.
- [12] F.G. Asenjo, “Antinomicality and the Axiom of Choice”, Logic and Logical Philosophy, Toruń: Nicholas Copernicus University Press, 1996, No. 4.

**ACTIVIDADES DE LA REAL ACADEMIA DE CIENCIAS  
EXACTAS, FÍSICAS, QUÍMICAS Y NATURALES DE ZARAGOZA  
EN EL AÑO 2009**

**Sesiones:**

En el año 2010 la Real Academia de Ciencias de Zaragoza celebró cinco sesiones, una de ellas con motivo de los discursos de Ingreso del nuevo Académico Numerario Ilmo. Sr. D. Manuel Quintanilla y otra con motivo de la entrega de Premios de Investigación.

Las sesiones tuvieron lugar los días 27 de enero, 24 de marzo, 28 de septiembre, 1 de diciembre y 20 de diciembre. Las sesiones de ingreso y de entrega de premios se desarrollaron en las fechas que se indican a continuación:

- El 24 de marzo de 2010, con motivo del discurso de ingreso del Académico Numerario Ilmo. Sr. D. Manuel Quintanilla Montón, con el título de *Más de medio siglo de la holografía*. Le respondió en nombre de la Academia, el Ilmo. Sr. D. Miguel Angel Rebolledo Sanz.
- El 1 de diciembre se entregaron los Premios de Investigación 2009-2010.

**Nuevo Académico Numerario:**

- Ilmo. Sr. D. Manuel Quintanilla Montón, Académico Numerario (Sección de Físicas) con la Medalla Nº 20.

## **Nuevo Secretario de la Academia:**

- En la Sesión de 27 de enero de 2010 el Ilmo. Sr. D. José F. Cariñena Marzo fue elegido nuevo Secretario de la Academia en sustitución del Ilmo. Sr. D. Mariano Gasca González.

## **Publicaciones de la Academia:**

Además de publicar el discurso del nuevo académicos, la Academia ha publicado el volumen **64** de la Revista de la Academia de Ciencias de Zaragoza, y los volúmenes **33** y **34** de la serie Monografías de la Academia de Ciencias, con los títulos *Proceedings of the Mcalv6(5) Conference* y *Maths and Fire*, respectivamente.

## **Organización de Congresos y Conferencias:**

La Academia ha organizado en 2010, entre otros, los siguientes eventos:

- Conferencia del Académico Correspondiente D. Miguel V. Andrés Bou el día 10 de julio, con el título “*Interacción acusto-óptica en fibra: avances recientes y aplicaciones*”.
- Organización conjunta con Senatus Científico y la Facultad de Ciencias de una conferencia del Profesor Eduard Punset el día 27 de abril.
- Los días 22–24 de febrero la Real Academia de Ciencias de Zaragoza organizó por medio de su Presidente y actuando como Secretario Científico el Académico Sr. R. Núñez-Lagos, la *International Conference on the Centenary of Giulio Racah*, con la colaboración de la Fundación Areces.
- La Academia ha colaborado con el Departamento de Matemáticas de la Universidad de Zaragoza, en la organización del *Cuarto encuentro de Álgebra y Geometría Pau-Zaragoza*, celebrado en Zaragoza los días 15 y 16 de abril, y en el *XVII Encuentro de Topología*, Zaragoza 2010, los días 26 y 27 de noviembre.
- La Real Academia de Ciencias colaboró en las *XI Jornadas Aragonesas de Paleontología* dedicadas a “*La Paleontología en los Museos*” celebradas en Ricla del 1 al 3 de octubre junto con el Museo Paleontológico de Zaragoza y la Institución Fernando el Católico.
- Colaboración en la organización conjunta con la Facultad de Ciencias de los Ciclos de Conferencias *Cita con la Ciencia y Espacio Facultad 2009-2010*.

- La Academia también ha colaborado en la organización del *Taller de Talento Matemático* que, con objeto de promover el descubrimiento de habilidades matemáticas en niños y niñas, tiene lugar anualmente bajo la dirección del Académico D. Alberto Eduque Palomo, quien también presentó la conferencia *Knots and numbers* en el Centro de Educación Secundaria Borgarskolan en Malmö (Suecia) en el mes de diciembre.

Dentro de la habitual participación de Académicos en numerosos Congresos nacionales e internacionales, y en conferencias en el ámbito de la difusión de la ciencia, cabe destacar las siguientes actuaciones.

- Del 4 al 9 de julio de 2010 se celebró en Úbeda (Jaén) el congreso internacional *I Jaen Conference on Approximation Theory, Computer Aided Geometric Design, Numerical Methods and Applications*, con la participación de 150 investigadores. El congreso dedicó una Sesión Especial de homenaje al Académico Mariano Gasca, por “haber sido pionero en los Métodos Numéricos de Aproximación en la universidad española y por su proyección internacional”, con motivo de su jubilación y paso a Emérito en la Universidad de Zaragoza. En la Sesión contribuyeron tanto investigadores extranjeros coautores de los trabajos del profesor Gasca como sus discípulos españoles, hoy catedráticos de distintas universidades.
- El Excmo Sr. Presidente asistió invitado al *Congreso conmemorativo por Giulio RACAH* en Jerusalén, ISRAEL en junio, y al centenario de la *Calcutta Mathematical Society* en diciembre en Calcutta (India), donde presentó además una comunicación. También presentó una comunicación científica en el *International Congress of Mathematicians (ICM)* en Hyderabad, INDIA, en el mes de agosto.
- El Secretario D. J.F. Cariñena fue miembro del Comité Científico de: *Trimester COMBINATORICS AND CONTROL 2010 (COCO2010) i-MATH* April-June, 2010, y presentó conferencias invitadas en *Recent advances in time-asymmetric Quantum Mechanics, quantization and Related Topics*, Valladolid, *XXV Workshop on Diff. Geom. Methods in Theoretical Mechanics* en Levico Terme (Italia) en agosto y *The Third Iberian Mathematical Meeting* en Braga (Portugal) en Octubre.
- El Académico Luis Oro fue Conferenciante plenario en las siguientes conferencias internacionales: *Inaugural International Conference on Molecular and Functional Catalysis*, Singapore, julio 2010, *45 Congreso Mexicano de Química*, Riviera Maya, Méjico, septiembre 2010, y *53rd Polish Chemical Society Congress*, Gliwice, Polonia, septiembre 2010.
- El Académico D. Enrique Artal impartió conferencias plenarias en *Conference on Algebra and Algebraic Geometry with Applications: Celebration of the Eightieth*

*Birthday of Professor Shreeram S. Abhyankar* en Purdue University, July 20-22, y en la *International Conference on Algebra and Algebraic Geometry* en homenaje a Shreeram S. Abhyankars 80th birthday Pune, India, December 17-22, 2010

- Conferencia invitada dentro del Máster de Biología y Biomedicina del IMIBIC/Universidad de Córdoba del Académico D. Manuel Doblaré, el 7 de enero, sobre *Modelado y simulación del comportamiento tisular. Aplicaciones en planificación preoperatoria y medicina regenerativa.*
- Conferencia invitada del Académico D. Manuel Doblaré, el 17 NILS Meeting 2010- Scientific collaboration opportunities between Spain, Norway, Iceland and Liechtenstein, en Madrid el 21 de enero, con el título *Some applications in computational mechado-chemo-biology.*
- El Académico D. Manuel Doblaré fue Profesor invitado del curso de verano *Bone cell and tissue mechanics*, en Udine (Italia). Otras conferencias invitadas del mismo fueron: *Medicina regenerativa trasnacional. Proyecto Bioscaff*, en la III Conferencia anual de las plataformas tecnológicas de investigación biomédica: Medicamentos innovadores, nanomedicina y tecnología sanitaria. Fomentando la colaboración público-privada (Barcelona, 23-24 febrero), *Some applications in computational mechado-chemo-biology*, en el 9th International Symposium. Computer methods in biomechanics and biomedical engineering (Valencia, 24 -27 febrero), *Biological healing. Biomimetic Concepts for self-healing materials*, dentro de las Jornadas *Latest advances in the development of self healing materials* en *Fourth meeting of the IOP sponsored collaboration between TU Delft-University of Zaragoza*, Instituto de Matemática Interdisciplinar (Universidad Complutense de Madrid. 26 de Mayo), *Fundamental aspects in modelling the constitutive behaviour of fibered soft tissues*, en el CST 2010-10 th International Conference on Computational Structures Technology. (Valencia. 14-17 de septiembre), y *On modelling living tissue and organs. Mechanical and mechanobiological aspects*, en Exascale Challenges in Computational Biology. (Barcelona, 15 de diciembre).
- El Prof. D. Manuel Doblaré impartió la lección inaugural curso 2010-2011 de la Universidad de Zaragoza titulada *Ingeniería biológica. Una ingeniería para el siglo XXI*, el 20 de septiembre.
- El Académico D. Antonio Elipe ha sido conferenciante invitado en el *5th International Workshop and Advanced School for Spaceflight Dynamics and Control*. University of Beira Interior. Covilhã, Portugal. March 17–19, y en el *Kyle T. Alfriend Astrodynamics Symposium*. Monterey, California, May 17–19.

- El Académico A. Elduque fue Conferenciante plenario de la sesión especial: *Nonassociative Algebras* en el First Joint Meeting American Mathematical Society - Sociedad de Matemática de Chile. Pucón (Chile, diciembre 2010). Igualmente, impartió un curso en la Universidad de Sevilla en el mes de Febrero con el título *Lie algebras: Killing-Cartan classification*, dentro la Advanced School on Lie and Representation Theories y que contó con la participación de alumnos de 4 países.

Varios Académicos colaboran con cursos propios en la Universidad de la Experiencia que organiza la Universidad de Zaragoza

### **Premios de investigación 2009**

Se convocaron los Premios de Investigación 2009-2010 de la Academia correspondientes a las secciones de Exactas y Físicas. En la sección de Exactas, el Premio fue para al Profesor **Javier Otal**, Catedrático del Departamento de Matemáticas de la Universidad de Zaragoza. En la sección de Físicas el premio se le otorgó al Dr. D. **Fernando Luis** del Departamento de Física de la Materia Condensada y del Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón. Los premiados expusieron sendos trabajos de investigación en la sesión celebrada el 1 de diciembre y se les hizo entrega del **Premio Investigación 2010**. Los trabajos de investigación con los títulos respectivos de *Grupos lineales de dimensión infinita: cómo los hemos estudiado* y *El efecto túnel en magnetismo*, se publicarán en el volumen 65 de la Revista de la Real Academia.

Se ha iniciado el proceso para los Premios 2010-2011 en las Secciones de Químicas y Naturales.

### **Distinciones y Nombramientos a Académicos.**

El Académico D. Enrique Artal fue nombrado Miembro del Comité Científico del Congreso del Centenario de la RSME.

El Académico D. Alberto Elduque ha sido nombrado Adjunto a la Coordinación del Área de Matemáticas de la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva, del Ministerio de Ciencia e Innovación.

El Académico Manuel Doblaré ha recibido el nombramiento de Miembro del World Council of Biomechanics, como Miembro del Consejo Editorial de la revista *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering* y como Editor Asociado de la revista internacional *Métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería* y de la *Encyclopedia of life support Systems*, así como de miembro del comité científico 9th World Congress on Computational Mechanics WCCM/APCOM 2010, Sydney (Australia), 10th International Conference on Computational Structures Technology, Valencia (España), septiembre 2010 y el XXVIII Congreso Anual de la Sociedad Española de Ingeniería Biomédica, noviembre 2010.

## **Otros datos.**

La Real Academia de Ciencias de Zaragoza ha sido subvencionada para su funcionamiento habitual, por el Ministerio de Educación y Ciencia, a través del programa de apoyo a las Reales Academias asociadas al Instituto de España, siendo la subvención para 2010 de 7000 euros.

Se ha continuado poniendo al día la página web de la Academia, cuya dirección es  
<http://www.unizar.es/acz/>

Zaragoza, diciembre de 2010

# REVISTA DE LA REAL ACADEMIA DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES DE ZARAGOZA

## Abstract

La Revista de la Real Academia de Ciencias publishes original research contributions in the fields of Mathematics, Physics, Chemistry and Natural Sciences. All the manuscripts are peer reviewed in order to assess the quality of the work. On the basis of the referee's report, the Editors will take the decision either to publish the work (directly or with modifications), or to reject the manuscript.

## 1 Normas generales de publicación

### 1.1 Envío de los manuscritos.

Para su publicación en esta Revista, los trabajos deberán remitirse a

Académico-Director de Publicaciones  
Revista de la Academia de Ciencias  
Universidad de Zaragoza  
50009 Zaragoza

o bien electrónicamente a la cuenta `elipe@unizar.es`.

La Revista utiliza el sistema de *offset* de edición, empleando el texto electrónico facilitado por los autores, que deberán cuidar al máximo su confección, siguiendo las normas que aquí aparecen.

Los autores emplearán un procesador de texto. Se recomienda el uso de LaTeX, para el que se han diseñado los estilos `academia.sty` y `academia.cls` que pueden obtenerse directamente por internet en <http://www.unizar.es/acz/> o por petición a la cuenta de correo electrónico: `elipe@unizar.es`.

### 1.2 Dimensiones

El texto de los trabajos, redactados en español, inglés o francés, no deberá exceder de 16 páginas, aunque se recomienda una extensión de 6 a 10 páginas como promedio. El texto de cada página ocupará una caja de 16 × 25 cm., con espacio y medio entre líneas.

## **2 Presentación del trabajo.**

Los trabajos se presentarán con arreglo al siguiente orden: En la primera página se incluirán los siguientes datos:

- a) *Título del trabajo*: Conciso, pero ilustrativo, con mayúsculas.
- b) *Autor*: Nombre y apellidos del autor o autores, con minúscula.
- c) *Centro*: Centro donde se ha realizado, con su dirección postal.
- d) *Abstract*: En inglés y con una extensión máxima de 200 palabras.
- e) *Texto*

A) Los encabezamientos de cada sección, numerados correlativamente, serán escritos con letras **minúsculas** en negrita. Los encabezamientos de subsecciones, numerados en la forma 1.1, 1.2, ..., 2.1, 2.2, ..., se escribirán en cursiva.

B) Las fórmulas estarán centradas y numeradas correlativamente.

C) Las referencias bibliográficas intercaladas en el texto, deben ser fácilmente identificables en la lista de refencias que aparecerá al final del artículo, bien mediante un número, bien mediante el nombre del autor y año de publicación.

D) Las figuras y tablas, numeradas correlativamente, se intercalarán en el texto. Las figuras se enviarán en formato EPS, o que se pueda convertir a éste con facilidad. Los apéndices, si los hay, se incluirán al final del texto, antes de la bibliografía.

G) Las referencias bibliográficas de artículos deberán contener: Autor: año de publicación, “Título del artículo”, revista **número**, páginas inicial–final. En el caso de libros, deberá incluirse: Autor: año de publicación, *Título del libro*. Editorial, lugar de publicación.

## **3 Notas finales**

Por cada trabajo publicado, se entregarán al autor o autores un total de 25 separatas. La Revista permite la inclusión de fotografías o figuras en color, con un coste adicional que correrá a cargo de los autores.

**Antonio Elipe**  
Académico Editor

RELACIÓN DE REVISTAS NACIONALES QUE RECIBE EN INTERCAMBIO  
LA BIBLIOTECA DE LA ACADEMIA DE CIENCIAS

ACTA BOTANICA BARCINONENSIS

ACTA QUIMICA COMPOSTELANA - Departamento de Química Analítica

AFINIDAD - Revista Química Teórica y Aplicada

ANALES DE BIOLOGIA - Sección de Biología General (Murcia)

ANALES DEL JARDIN BOTANICO DE MADRID

ANALES DE LA REAL ACADEMIA DE DOCTORES

ANALES DE LA UNIVERSIDAD DE MURCIA

ANALES DE CIENCIAS - Facultad de Ciencias (Químicas y Matemáticas) (Murcia)

ANALES SECCION DE CIENCIAS - Colegio Universitario de Girona

ANUARIO DEL OBSERVATORIO ASTRONOMICO - Madrid.

BELARRA. SOCIEDAD MICOLOGICA. Baracaldo.

BLANCOANA - Col. Univ. "Santo Reino" Jaén

BOLETIN DA ACADEMIA GALEGA DE CIENCIAS - (Santiago de Compostela)

BOLETIN DE LA ASOCIACION HERPETOLOGICA ESPAÑOLA

BOLETIN GEOLOGICO Y MINERO

BOTANICA COMPLUTENSIS - Madrid

BUTLLETI DEL CENTRO D'HISTORIA NATURAL DE LA CONCA DE BARBARA

COLLECTANEA BOTANICA - (Barcelona)

COLLECTANEA MATEMATICA - (Barcelona)

ESTUDIO GENERAL - Revista Colegio Universitario (Girona)

EXTRACTA MATHEMATICAE - Universidad de Extremadura

FACULTAD DE CIENCIAS EXPERIMENTALES DE JAEN. Monografías.

FOLIA BOTANICA MISCELLANEA - Departamento de Botánica (Barcelona)

GACETA DE LA REAL SOCIEDAD MATEMÁTICA ESPAÑOLA

INDICE ESPAÑOL DE CIENCIA Y TECNOLOGIA -

INSTITUTO GEOLOGICO Y MINERO DE ESPAÑA

INVESTIGACION E INFORMACION TEXTIL Y DE TENSIOACTIVIVOS (C.S.I.C.)  
- Barcelona

LACTARIUS.- BOL. DE LA ASOCIACION MICOLOGICA - Jaen

LUCAS MALLADA - Inst. Est. Altoaragoneses.

MEMORIAS DE LA REAL ACADEMIA DE CIENCIAS Y ARTES DE BARCELONA  
MISCELLANEA ZOOLOGICA - Museo Zoológico - Ayuntamiento de Barcelona  
NATURALIA BAETICA - Jaen  
PIRINEOS  
PUBLICACIONES PERIODICAS DE LA BIBLIOTECA DEL MUSEU DE ZOOLOGIA  
- (Barcelona)  
REBOLL.- Bull. Centro d'Historia Natural de la Concha de Barbera.  
REVISTA DE LA ACADEMIA CANARIA DE CIENCIAS  
REVISTA REAL ACADEMIA GALEGA DE CIENCIAS  
REVISTA DE BIOLOGIA DE LA UNIVERSIDAD DE OVIEDO  
REVISTA ESPAÑOLA DE FÍSICA  
REVISTA ESPAÑOLA DE FISIOLOGIA - Pamplona  
REVISTA ESPAÑOLA DE HERPETOLOGIA  
REVISTA IBERICA DE PARASITOLOGIA  
REVISTA MATEMATICA COMPLUTENSE - (Madrid)  
REVISTA DE OBRAS PUBLICAS  
REVISTA DE LA REAL ACADEMIA DE CIENCIAS EXACTAS, FISICAS Y NATURALES DE MADRID – Matemáticas  
REVISTA DE LA REAL ACADEMIA DE CIENCIAS - QUIMICA - Madrid  
RUIZIA - Monografías del Jardín Botánico (Madrid)  
SCIENCIA GERUNDENSIS  
STUDIA GEOLOGICA SALMANTICENSE - Universidad de Salamanca  
TRABAJOS DE GEOLOGIA - Universidad de Oviedo  
TREBALLS DEL CENTRE D'HISTORIA NATURAL DE LA CONCA DE BARBERA.  
TREBALLS DE L'INSTITUT BOTANIC DE BARCELONA  
TREBALLS DEL MUSEU DE ZOOLOGIA DE BARCELONA  
ZOOLOGIA BAETICA. UNIVERSIDAD DE GRANADA.

RELACIÓN DE REVISTAS INTERNACIONALES QUE RECIBE EN  
INTERCAMBIO LA BIBLIOTECA DE LA ACADEMIA DE CIENCIAS

ACADEMIA NACIONAL DE CIENCIAS - Córdoba. Argentina  
ACADEMY OF NATURAL SCIENCES OF PHILADELFIA  
ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCIEI - Notiziario  
ACCADEMIA UDINESE DI SCIENZI LETTERS ED ARTI.  
ACTA ENTOMOLOGICA MUSEI NATIONALIS PRAGAE  
ACTA FAUNISTICA ENTOMOLOGICA MUSEI NATIONALIS - Pragae  
ACTA GEOLOGICA POLONICA - Warszawa  
ACTA MATHEMATICA HUNGARICA  
ACTA MATEMATICA SINICA - New Series China  
ACTA MUSEI NATIONALI PRAGAE  
ACTA ORNITHOLOGICA - Polska Akademia Nauk Warszawa  
ACTA PHYSICA - Academia Scientarum Hungaricae  
ACTA SOCIETATIS ENTOMOLOGICA BOHEMOSLOVACA  
ACTA UNIVERSITATIS - Series: Mathematics and Informatic – University of Nis –  
Yugoslavia  
ACTA ZOOLOGICA FENNICA  
AGRONOMIA LUSITANICA - Est. Agr. Nac. Sacavem - Portugal  
AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN  
ANALES DE LA ACADEMIA NACIONAL DE CIENCIAS EXACTAS, FISICAS Y  
NATURALES DE BUENOS AIRES  
ANALES DE LA ESCUELA NACIONAL DE CIENCIAS BIOLOGICAS. México  
ANALES DE LA SOCIEDAD CIENTIFICA ARGENTINA  
ANALES DE LA ESCUELA NACIONAL DE CIENCIAS BIOLOGICAS - México  
ANIMAL BIODIVERSITY CONSERVATION  
ANNALEN DES NATURHISTORICHEN MUSEUMS IN WIEN  
ANNALES ACADEMIA SCIENTARUM FENNICAЕ - Serie A - I Matematica - Helsinki  
ANNALES ACADEMIA SCIENTARUM FENNICAЕ - Serie A - II Chemica - Helsinki  
ANNALES ACADEMIA SCIENTARUM FENNICAЕ - III Geologica Geografica - Helsinki  
ANNALES ACADEMIA SCIENTARUM FENNICAЕ - Serie A - IV Physica - Helsinki  
ANNALES HISTORICO NATURALES - Musei Nationalis Hungarici

ANNALES DE L'INSTITUT FOURIER - Université de Grenoble  
ANNALES DE L'INSTITUT FOURIER - Gap  
ANNALES DE LA SOCIETE SCIENTIFIQUE - Serie I - Science Mathematiques Physiques  
Bruxelles  
ANNALES UNIVERSITATIS MARIA CURIE - Sectio A Mathemat. - Sklodowska  
ANNALES UNIVERSITATIS MARIA CURIE - Sklodowska - Sectio AA Chemica. Lublin.  
ANNALES UNIVERSITATIS MARIA CURIE - Sklodowska - Sectio AAA Physica. Lublin.  
ANNALES ZOOLOGICI FENNICI - Helsinki  
ANNALI DELLA FACOLTA DE AGRARIA - Universita de Pisa  
ANNALI DEL MUSEO CIVICO DI STORIA NATURALE "Giacomo Doria"  
ARBOLES Y SEMILLAS DEL NEOTROPICO - Museo Nac. de Costa Rica  
ARCHIVIO GEOBOTANICO - Univ de Pavía.  
ATTI DELLA ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI. RENDICONTI LINCEI - Matematica e Applicazioni - Roma  
ATTI DELLA ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI. RENDICONTI LINCEI - Scienze Fisiche e Naturali - Roma  
ATTI DELLA ACCADEMIA DI SCIENZE, LETTERE E ARTI DI UDINE  
ATTI DELL'INSTITUTO BOTANICO E DEL LABORATORIO CRITTOGRAMICO  
DELL'UNIVERSITA DI PAVIA  
BAYERISCHE AKADEMIE DR WISSENSCHAFTEN - Munchen  
BEITRAGE ZUR FORSCHUNSTECHOLOGIE - Akademie Verlag Berlin  
BOLETIM DA SOCIEDADE PARANAENSE DE MATEMATICAS - Paraná  
BOLETIM DA SOCIEDADES PORTUGUESA DE CIENCIAS NATURALES - Lisboa  
BOLETIN DE LA REAL ACADEMIA DE CIENCIAS FISICAS, MATEMATICAS Y  
NATURALES - Caracas  
BOLETIN DE LA ACADEMIA DE CIENCIAS - Córdoba. Argentina.  
BOLETIN BIBLIOGRAFICO DE LA ESCUELA NACIONAL DE CIENCIAS BIOLÓGICAS - México  
BOLETIN DEL MUSEO NAC. DE COSTA RICA.  
BOLETIN DE LA SOCIEDAD MATEMATICA MEXICANA  
BOTANY UNIV. OF CALIFORNIA PUBLICATIONS.  
BRENESIA - Museo Nacional de Costa Rica  
BULGARIAN ACADEMY OF SCIENCES - Scientific Information - CENTRE MATHEMATICAL AND PHYSICAL SCIENCES  
BULGARIAN JOURNAL OF PHYSICS  
BULLETIN OF THE AMERICAN MATHEMATICAL SOCIETY - Providence  
BULLETIN DE LA CLASSE DE SCIENCES - Academie Royale de Belgique - Bruxelles  
BULLETIN OF THE GEOLOGICAL INSTITUTION OF THE UNIVERSITY UPSALA

BULLETIN OF THE JSME (Japan Society of Mechanical Engineers)  
BULLETIN DE LA SOCIETE SCIENTIFIQUE DE BRETAGNE - Rennes  
CALIFORNIA AGRICULTURE - University of California  
CIENCIAS TECNICAS FISICAS Y MATEMATICAS. Academia de Ciencias. Cuba.  
COLLOQUIUM MATHEMATICUM - Warszawa  
COMMENTATIONES MATHEMATICAES - Ann. So, Mathematicae Polonese  
COMPTES RENDUS DE L'ACADEMIE BULGARE DE SCIENCES - Sofia  
DARWINIANA REV. INST. BOTANICA DARWINION - República Argentina  
DORIANA - Supplementa agli Annali del Museo Civico di Storia Naturale "G. Doria" - Cenova  
ESTUDOS, NOTAS E TRABALHOS DO SERVICIO DE FOMENTO MINERO - Portugal  
ESTUDOS, NOTAS E TRABALHOS, DIECCIÓN GERAL DE GEOLOGIA E MINAS - Porto  
FILOMAT - FACTA UNIVERSITATIS - Univ. af Nis.  
FÍSICA DE ONDAS ACÚSTICAS Y ELECTROMAGNÉTICAS LINEALES - Acad. Búlgara de las Ciencias  
FOLIA ANATOMICA UNIVERSITATIS CONIMBRIGENSIS - Coimbra  
FOLIA ZOOLOGICA - Czechoslovak Academy of Sciences  
FUNCTIONS ET APPROXIMATIVE COMMENTARI MATHEMATICI - Poznań  
GLASNIK MATEMATICKI - Zagreb  
IBC - INFORMAZIONI - Rivista Bimestrale Inst. Beni. Artistic. - Regione Emilia-Romagna  
INSTITUTO DE MATEMATICA - Univ. Nac. del Sur - Bahia Blanca - Argentina  
INSTITUTO NACIONAL DE INVESTIGAÇÃO AGRARIA - Estação AGRONOMICA NACIONAL OEIRAS INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO DE CIENFUEGOS  
INTERNATIONAL TIN RESEARCH INSTITUTE  
JAHRBUCH DER AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN IN GÖTTINGEN.  
JOURNAL OF THE AMERICAN ACADEMY OF ARTS AND SCIENCES - Daedalus  
JOURNAL OF THE BULGARIAN ACADEMY OF SCIENCES  
JOURNAL OF THE LONDON MATHEMATICAL SOCIETY  
JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS - Amsterdam  
LESTURAS MATEMATICAS - Colombia  
MATHEMATICA BALKANICA  
MATHEMATICA MONTISNIGRA  
MEMORABILIS ZOOLOGICA  
MEMORANDA SOCIETATIS PROFAUNA ET FLORA FENNICA - Helsingfors  
MEMORIAS DA ACADEMIA DAS CIENCIAS DE LISBOA (Classe de Ciencias)  
MITTEILUNGEN AUS DEN ZOOLOGISCHEN MUSEUM IN BERLIN

MONOGRAFIAS DE LA ACADEMIA NACIONAL DE CIENCIAS EXACTAS, FISICAS Y NATURALES DE BUENOS AIRES  
NACHRICHTEN DER AKADEMIE DER WISSENSCHAFTEN IN GUTTINGEN - II  
Matemáticas y Física  
NATURAL HISTORY MUSEUM UNIV. OF KANSAS.  
NEOTROPICO - Museo Nacional de Costa Rica  
NETHERLANDS JOURNAL OF ZOOLOGY  
NONLINEARITY - Inst. Physics and London Math. Soc  
NOTAS DE ALGEBRA Y ANALISIS - Ins. de Matematica - Univ. Atac. del Sur. Bahia Blanca  
NOTULAE NATURAE  
NUCLEAR ENERGY -Bulgarian Academy of Sciences  
OCCASIONAL PAPERS OF THE CALIFORNIA ACADEMY OF SCIENCES - San Francisco  
PHILIPPINE JOURNAL OF SCIENCES - Manila  
POLISH ACADEMY OF SCIENCES. INSTITUTE OF MATHEMATICA  
POLSKA AKADEMIE NAUK-PRACE GEOLOGICZNE  
POLSKA AKADEMIE NAUK-PRACE MINERALOGICZNE  
PORTUGALIA PHYSICA - Sociedade Portuguesa de Física  
PROCEEDINGS OF THE ACADEMY OF NATURAL SCIENCES OF PHILADELPHIA  
PROCEEDINGS OF THE CALIFORNIA ACADEMY OF SCIENCES  
PROCEEDINGS OF THE LONDON MATHEMATICAL SOCIETY  
PROCEEDINGS OF THE ROCHESTER ACADEMY OF SCIENCES  
PROCEEDINGS OF THE ROYAL SOCIETY OF LONDON - A: Mathematical and Physical Sciences  
PROCEEDINGS OF THE ROYAL SCOIETY OF EDINBURGH - Section A (Mathematical and Physical Sciences)  
PROCEEDINGS OF THE ROYAL SOCIETY OF QUEENSLAND  
PUBLICACIONES FUNDAMENTALES DE LA ACADEMIA DE CIENCIAS DE SOFIA  
PUBLICATION DE L'INSTITUT DE RECHERCHE MATHEMATIQUE AVANCEE - Strasbourg  
PUNIME MATEMATIKE - Prishtine  
QUADERNI DELL' ACADEMIA UDINESA.  
QUATERLY OF APPLIED MATHEMATICS  
REVISTA CUBANA DE FISICA  
REVISTA COLOMBIANA DE MATEMÁTICAS

REVISTA DE LA FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA- Univ. Nat. del Litoral - Argentina

REVISTA TRIMESTRAL DEL INTERNATIONAL TIN RESEARCH INSTITUTE

REVISTA UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA - Argentina

REVISTA DE LA UNION MATEMATICA ARGENTINA

REZIMEA ABSTRACTS - POGDORICA

SCIENCE BULLETIN - University of Kansas

SCIENTIFIC PAPERS NAT. HISTORY MUSEUM. The University Kansas.

SEARCH AGRICULTURAL ITHACA NEW YORK

SENCKENBERGIANA BIOLOGICA - Frankfurt

SENCKENBERGIANA LETHAEA - Frankfurt

SMITHSONIAN CONTRIBUTIONS TO PALEONTOLOGY

SPECTRUM - Akademie der Wissenschaften der DDR

STUDIA GEOLOGICA POLONICA - Polska Akademy Nauk Warsovia

SUT JOURNAL OF MATHEMATICS - Science University of Tokio

T. KOSCIUSZKI TECHNICAL - Univesity of Cracow

UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA - Notas del museo de la Plata

UNIVESITY OF THE STATE OF NEW YORK - Bulletin

UNIVERSITY OF KANSAS PALEONTOLOGICAL CONTRIBUTIONS

VERTEBRATOLOGICKE ZPRAVY CESKOLOVENSKA AKADEMIE BRNO

ZBORNIK RADOVA FILOZOFSKOG - Fakulteta u Nisu-Serija Matematika

ZBORNIK - Acta Musei Nationalis - Pragae

ZOOLOGICA POLONIAE

ZPRAVY USEB (Vertebralogy zpravy) - Brno - Checoslovaquia