

La física estadística de equilibrio. Transiciones de fase

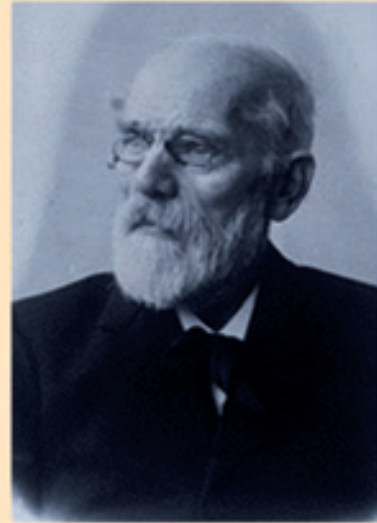
Pedro Tarazona y Enrique Chacón

Los inicios: Sistemas ideales y teorías campo medio

En 1902, un año antes de la fundación de la RSEFyQ, se publica el libro *Elementary Principles in Statistical Mechanics*, con el que J.W. Gibbs culmina los fundamentos de la Mecánica Estadística clásica en su aplicación a sistemas en equilibrio. Este libro presenta ya una visión moderna de las propiedades termodinámicas de la materia en términos de sus características microscópicas, estableciendo la relación entre los colectivos estadísticos y los correspondientes potenciales termodinámicos, y abre el debate sobre la indistinguibilidad de las partículas al plantear la paradoja de Gibbs.

El propio Gibbs había acuñado en 1884 el término de Mecánica Estadística para designar el edificio formal construido en el último tercio del siglo XIX cuando, con el formalismo de la Termodinámica ya consolidado, Maxwell y Boltzmann consiguen culminar la teoría cinética de los gases demostrando que las leyes de los gases ideales se pueden derivar a partir de un tratamiento estadístico de los choques moleculares. La ecuación de Boltzmann para la evolución temporal de las funciones de distribución de no-equilibrio se presenta en 1872, precediendo en cinco años a su interpretación probabilística de la entropía como medida del número de microestados compatible con un estado macroscópico en equilibrio. Para calcular el número de microestados, Boltzmann discretiza de forma arbitraria el espacio de las fases en *regiones elementales*, anticipándose a la posterior justificación de este hecho por la Mecánica Cuántica. Gibbs extiende estos conceptos a los colectivos canónico y gran canónico, facilitando el estudio teórico de sistemas como los gases ideales (con o sin campos externos), osciladores armónicos, y rotores libres, que siguen constituyendo los ejemplos básicos en nuestros cursos elementales de Física Estadística.

El tratamiento mecano-estadístico de sistemas con interacciones entre sus componentes es tan fácil de plantear como difícil de resolver. Las funciones de partición implican integrales o sumas sobre el inmenso espacio de las fases, que las interacciones hacen no-factorizables en sus componentes elementales; pero es precisamente esa no-factorizabilidad de las funciones de partición la que crea las *propiedades colectivas emergentes*, por usar el término moderno; es decir, todas esas propiedades de la materia que sólo podemos entender como resultado de una cooperación entre un número (casi) infinito de componentes. Las transiciones de fase son el tipo más rico en variedad e interés de esas propiedades. El gran pionero en su estudio fue J. D. van der Waals, que en 1873, aprovechando el cambio de la legislación holandesa que eximió a los estudiantes de ciencias del examen de Lenguas Clásicas, pudo presentar la tesis doctoral en la que derivaba su famosa ecuación de estado. Este trabajo, que le valdría el premio Nobel de Física en 1913, contiene ya



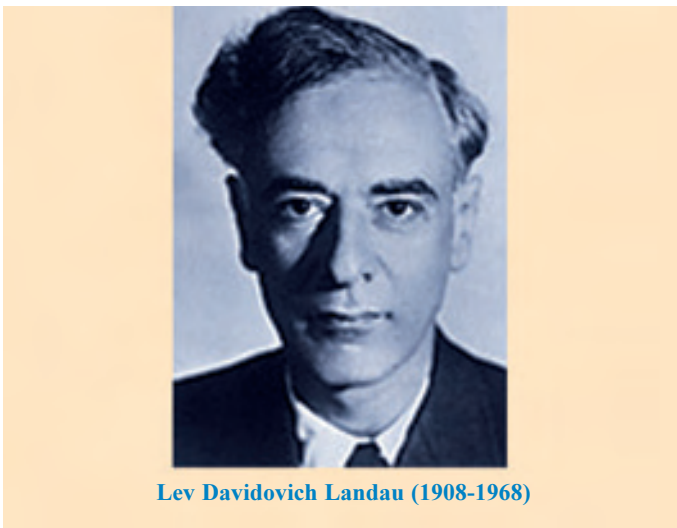
Johannes Diderik van der Waals (1837-1923)

los dos elementos que van a marcar la Física Estadística de sistemas con interacciones: el *modelismo* de las interacciones y la inclusión de sus efectos mediante *aproximaciones*, ya que no sabemos tratarlas de forma exacta. Por primera vez, van der Waals identifica la repulsión molecular de corto alcance y la atracción de largo alcance como dos elementos contrapuestos de la interacción entre átomos, incluyéndolos como volumen excluido y campo molecular en su ecuación de estado de los gases reales. Así, explica teóricamente la continuidad de las ecuaciones de estado de gases y líquidos y descubre la ley de los estados correspondientes, que se convierte en una excelente guía para la licuefacción del hidrógeno (Devar, 1898) y del helio (Kammerlingh Onnes, 1908). Hay que mencionar también su teoría de las mezclas binarias, que abre todo un campo experimental y es precursora de los conceptos de *universalidad* en transiciones de fase, al demostrar la equivalencia formal entre los puntos críticos líquido-gas y los puntos críticos de miscibilidad de dos líquidos. En sus trabajos, van der Waals utiliza unos planteamientos que parten de la termodinámica, incluyendo directamente en los potenciales termodinámicos del sistema los efectos de las interacciones, en vez de plantear la función de partición exacta del sistema y después tratar de aproximarla.

Ante la dificultad de calcular las funciones de partición en sistemas con interacciones, y con el rápido desarrollo de la Mecánica Cuántica, no resulta extraño que los principales avances de la Física Estadística durante el primer tercio del siglo XX se centren en los sistemas cuánticos ideales, en los que la indistinguibilidad de las partículas origina propiedades *emergentes* aún en ausencia de interacciones. El desarrollo de la Mecánica Cuántica había comenzado en 1900 con la propuesta de Planck sobre la cuantización del espectro de la

radiación electromagnética en equilibrio térmico [véase el monográfico de *Revista Española de Física* “100 años de quanta”, volumen 14, número 1 (2000)].

En 1907, Einstein publica su trabajo sobre el calor específico de los sólidos. En 1911, Sommerfeld hace notar que las regiones elementales del espacio de fases deben estar asociadas a la constante de Planck. El mismo año, Natanson propone que la ley de Plank es el resultado de la indistinguibilidad de los cuantos de luz. En 1924, Bose y Einstein plantean los fundamentos de la *estadística de bosones*, tal como los conocemos hoy en día; dos años más tarde, Fermi y Dirac fundamentan la *estadística de fermiones*. Dirac explica la existencia de dos *estadísticas ideales cuánticas* en términos de la simetría de la función de onda y, en 1927, von Neumann establece la formulación general de la Mecánica Estadística Cuántica. Estos conceptos comienzan a aplicarse para explicar las propiedades de sistemas fermiónicos: estrellas enanas blancas (Fowler, 1926; Stoner 1929;...), metales (Sommerfeld y Bloch, 1928); y bosónicos: helio superfuido (London, 1938). El premio Nobel de Física de 2001 se concedió por la observación experimental de la condensación de



Lev Davidovich Landau (1908-1968)

Bose-Einstein, en gases muy fríos y diluidos, 76 años después de su predicción teórica. La aplicación de la Mecánica Estadística al estudio de las propiedades magnéticas de la materia había empezado con los trabajos de Langevin y de Weiss a principios de siglo. En 1925, E. Ising presenta, en su tesis doctoral, el que actualmente conocemos como modelo de Ising para el magnetismo y, realizando la suma directa de la función de partición, obtiene la solución exacta en una dimensión de este sistema con interacciones. La ausencia de transición de fase ferromagnética en ese modelo resultó, al parecer, desconcertante y desalentadora. Por el contrario, el estudio realizado por Bragg y Williams (1934) del modelo de Ising en la aproximación de campo medio reproduce la transición paramagnético-ferromagnético, sin dependencia cualitativa con la dimensión del sistema.

Los efectos de las correlaciones

En 1935, Landau publica su tratamiento fenomenológico de las transiciones de fase de segundo orden partiendo de la idea de que cualquier transición de fase está asociada a una

transición *orden-desorden*, existiendo un parámetro que mide el grado de *orden* de cada fase. Con la hipótesis de que la energía libre es una función analítica (o un funcional para sistemas no homogéneos) del *parámetro de orden*, se extraen consecuencias genéricas para sistemas tan aparentemente distintos como gases, mezclas líquidas y *ferromagnetos* uniaxiales. Se trata pues, de la primera formalización de los conceptos de *universalidad* para las transiciones de fase. Otros sistemas, con parámetros de orden vectoriales (*ferromagnetos* isótropos,...), o tensoriales (cristales líquidos nemáticos), tendrán distintos comportamientos que podrán deducirse algebraicamente a partir de argumentos de simetría. La teoría de Landau puede verse como la validación formal del método de van der Waals, en el que se aproximan directamente las funciones termodinámicas.

Casi simultáneamente, en 1936, Mayer y colaboradores plantean el primer ataque serio al cálculo de la función de partición de sistemas clásicos con interacciones. Los desarrollos diagramáticos para los coeficientes del virial abren el camino hacia teorías capaces de describir *cuantitativamente* las propiedades de los sistemas a partir de sus interacciones moleculares. Así, se empiezan a entender los efectos de la correlación, es decir, de cómo cambia la probabilidad de encontrar una partícula en una posición si hay otra partícula en una posición cercana. El potencial de Lennard-Jones y Devonshire se presenta en 1937 y sigue siendo hoy en día el modelo más utilizado en la descripción teórica de fluidos simples.

En 1944 Onsager resuelve el modelo de Ising en dos dimensiones, con la primera solución *exacta* de un problema *no trivial* en Física Estadística para un sistema con interacciones. El resultado es una transición de fase ferromagnética, pero con unos exponentes críticos diferentes de los predichos por las teorías de campo medio o de Landau, así como de los observados experimentalmente en sistemas tridimensionales. La verificación experimental de los exponentes críticos bidimensionales obtenidos por Onsager se demoró 40 años, y sólo se consiguió mediante la analogía con un gas de red bidimensional (formalizada por Lee y Yang en 1952), observada con suficiente precisión en moléculas de metano adsorbidas sobre una superficie de grafito (Kim y Chan, 1984). Todavía hoy se cuentan con los dedos de una mano los modelos *realistas* resueltos exactamente y que tengan transiciones de fase para temperaturas no nulas; todos ellos, en dos dimensiones.

A partir de 1954 se abre una nueva etapa en el estudio de la Física Estadística con las primeras simulaciones por ordenador; primero, mediante el método de Monte Carlo (Metrópolis *et al.*, 1954) y, unos años después, mediante la dinámica molecular aplicada al cálculo de ecuaciones de estado (Alder y Wainwright, 1957), al descubrirse la transición de fase de cristalización en un sistema de esferas duras. El formidable desarrollo de la capacidad de cálculo en el último tercio del siglo XX hace que estos métodos de simulación por ordenador sean herramientas imprescindibles para el desarrollo de la Física Estadística, jugando un papel intermedio entre teoría y experimentos, puesto que permiten comprobar tanto la validez de las aproximaciones realizadas a un modelo como la capacidad del modelo para describir el sistema real. Es interesante señalar que el método de Monte Carlo corresponde a la realización numérica de las sumas

sobre colectivos estadísticos, según el planteamiento de Gibbs, mientras que la dinámica molecular hace realidad el sueño de la teoría cinética al obtener las propiedades termodinámicas a partir de los choques moleculares.



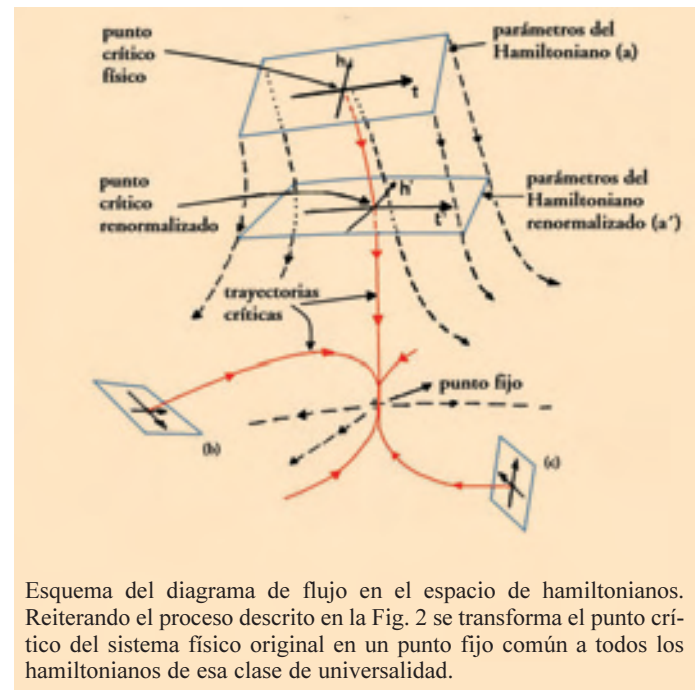
Kenneth G. Wilson, premio Nobel de Física 1982
y Leo Kadanoff

De forma paralela a las simulaciones numéricas, se desarrollan, durante la década de los 50, mejores métodos para el tratamiento aproximado de las correlaciones en modelos de red, extendiéndolos posteriormente a la teoría de líquidos, que inicia su etapa moderna durante la década de los 60 con el desarrollo de las *ecuaciones integrales* para las funciones de correlación y métodos perturbativos. La pieza central de la teoría de líquidos, la ecuación de Orstein-Zernike, había sido formulada en 1914 en un contexto aparentemente muy distinto, la opalescencia de los fluidos en la región crítica, evidencia directa del fenómeno de las fluctuaciones críticas, que llevó en la década de los 60 a una gran revolución en el campo de las transiciones de fase.

Los resultados experimentales de curvas isoterma y calores específicos para una gran variedad de fluidos que se habían venido acumulando durante todo el el siglo XX presentaban, en la región crítica, un clara discrepancia con las predicciones de la ecuación de van der Waals, confirmadas en su generalidad por la teoría de Landau. Por otra parte, aunque las técnicas diagramáticas para mejorar sistemáticamente las aproximaciones a la función de partición se seguían desarrollando a buen ritmo, y se intentaron extrapolar series del virial para predecir comportamientos críticos, los resultados eran bastantes desalentadores. Estas evidencias, junto con la predicción de Onsager para sistemas bidimensionales, van afianzando la idea de que la *teoría clásica* de las transiciones de fase críticas (o de segundo orden) es cualitativamente incorrecta, con discrepancias que se acentúan al disminuir la dimensión del sistema.

El primer paso importante hacia una *teoría moderna* de las transiciones críticas lo da B. Widom en 1965 cuando plantea la hipótesis de escalamiento que permite extender el concepto de *universalidad*, o de *ley de estados correspondientes*, fuera del ámbito de las funciones analíticas. Widom postula la existencia de las funciones de escala no analíticas (que dan divergencias al derivarlas) y que son universales dentro de cada clase (definida por las dimensiones espacial y del parámetro de orden); de este modo, un *ferromagneto* uniaxial presenta las mismas singularidades críticas que un fluido y que una aleación binaria desordenada, pero distintas de las de sistemas equivalentes en dos dimensiones. Por consiguiente, no pueden depender de los detalles concretos de cada sistema y deben ser el resultado de un principio mucho

más general, como el que había buscado Landau originalmente con la hipótesis de analiticidad. La causa física sólo podía provenir del efecto de las correlaciones a largo alcance entre los componentes del sistema, sean moléculas del fluido o espines del imán, puesto que cualquier teoría aproximada que despreciase estas correlaciones (teorías de campo medio) o que las incluyese parcialmente (entre posiciones vecinas), daba un comportamiento clásico, de acuerdo con la teoría de Landau. En 1966, Kadanoff presenta la *hipótesis de bloques* que interpreta las propiedades estadísticas de un modelo de Ising en términos de las propiedades estadísticas de otro modelo de Ising, en el que las variables microscópicas describen el comportamiento colectivo de un grupo de variables en el sistema original. Mientras que el tamaño de los bloques sea pequeño respecto de la longitud de correlación del sistema, el nuevo sistema debería ser equivalente al primero; así que, cerca del punto crítico (con la longitud de correlación de tamaño macroscópico), la formación de bloques debería pasar el sistema original a otro termodinámicamente similar aunque diferente en sus detalles microscópicos.



Esquema del diagrama de flujo en el espacio de hamiltonianos. Reiterando el proceso descrito en la Fig. 2 se transforma el punto crítico del sistema físico original en un punto fijo común a todos los hamiltonianos de esa clase de universalidad.

En 1971, K.G. Wilson, tras un largo esfuerzo que estuvo a punto de hacerle perder su contrato en Cornell por estar cuatro años sin publicar ningún trabajo, consigue resolver el problema mediante una técnica teórica, el llamado *grupo de renormalización*, que se había desarrollado en el contexto de la física de partículas elementales. En esencia, el procedimiento que le valdrá el premio Nobel en 1982 consigue convertir la dificultad del problema (las correlaciones críticas de alcance macroscópico) en su solución, apelando al concepto de *simetría de escala*: la equivalencia del sistema original con su propia imagen reducida por un factor arbitrario. El comportamiento no-analítico de las propiedades termodinámicas aparece como solución de una ecuación diferencial para la operación de simetría de cambio de escala, que tiene coeficientes perfectamente analíticos pero dependientes de la dimensión del sistema. Wilson y Fisher demuestran que,

por encima de dimensión cuatro, la teoría clásica de van der Waals y de Landau sería correcta, pero que al bajar la dimensión del sistema, sus propiedades críticas se van desviando cada vez más de ese comportamiento clásico.

En las transiciones de primer orden las correlaciones entre moléculas de un fluido o entre los espines de un material magnético están restringidas a distancias microscópicas (mayores que, aunque comparables con, el alcance de las interacciones); pero sus efectos pueden ser muy importantes para obtener predicciones cuantitativamente correctas de los diagramas de fase. Por ello, en los años posteriores a la formulación de la teoría moderna, se retoma con fuerza el estudio de las transiciones de fase de primer orden y de los sistemas no homogéneos, ya sean interfases o fases en sistemas confinados. Las ecuaciones integrales en teoría de líquidos se van mejorando sistemáticamente, aunque hasta la década de los 90 no se conseguirá conectarlas con el grupo de renormalización en la proximidad del punto crítico.



Defectos puntuales en una película nemática.
Cortesía de Oleg Lavrentovich

Durante los 70, se pone en marcha otra técnica teórica, el formalismo del funcional de la densidad, en sus versiones para propiedades electrónicas en Física del Estado Sólido y Química Cuántica, y para las propiedades estadísticas de fluidos clásicos y bosónicos. El formalismo venía precedido de la teoría de van der Waals para la estructura de las superficies líquidas a escala molecular y por el tratamiento genérico de Landau para la energía libre de sistemas no uniformes, mediante los gradientes del parámetro de orden. El nuevo marco formal permite relacionar las interacciones moleculares con la energía libre de sistemas no homogéneos, abriendo el camino a mejoras sistemáticas del nivel de aproximación. En particular, las aproximaciones basadas en ecuaciones integrales para las correlaciones en un líquido pueden ser descritas dentro del formalismo del funcional de la densidad de una forma más intuitiva. También resulta esencial su papel en el estudio de las *transiciones de mojado*, que se inicia en 1977 cuando Cahn aplica los escalamientos críticos de las tensiones superficiales al problema de una gota líquida sobre un substrato sólido. El estudio general de estas transiciones de fase superficiales revela comportamientos universales nada triviales para el papel de las paredes que contienen a un sistema que se acerca a una transición de fase de primer orden.

El desarrollo de aproximaciones funcionales *no-locales* durante la década de los 80 permite el estudio teórico de la cristalización de un fluido, bajo presión, a alta temperatura.

La simulación por dinámica molecular de la cristalización de las esferas duras, realizada por Alder y Wainwright en 1967, ya había demostrado que la intuición de que un cristal (ordenado) debe necesariamente tener menos entropía que un líquido (desordenado) es falsa. El proceso de formación de una fase cristalina puede ocurrir en un sistema puramente entrópico, como el modelo de esferas duras, con características similares a las observadas experimentalmente en sistemas reales. La dificultad en el estudio de la transición de cristalización estriba en la necesidad de describir al mismo nivel de aproximación tanto el líquido como el sólido, cuyos tratamientos (la teoría de estado sólido y la teoría de líquidos) estaban muy alejados entre sí. Esta dificultad se vence con el funcional de la densidad describiendo el cristal como un líquido muy inhomogéneo (distribución de densidad formada por picos en cada celda unidad) y pasa a requerir que tal inhomogeneidad sea auto-mantenida por las interacciones moleculares, sin necesidad de campos externos, y termodinámicamente estable frente al líquido uniforme descrito por el mismo funcional de la densidad. Los avances en este problema han continuado durante la década de los 90, siendo su exponente más notable la teoría de la *medida fundamental* de Rosenfeld. Debe subrayarse también que el papel de la dimensión del sistema, tan relevante en los fenómenos críticos, vuelve a ser importante en la transición de cristalización, ya que los defectos topológicos (dislocaciones y disclinaciones), que juegan un papel marginal en la estabilidad termodinámica de cristales tridimensionales, crean en dos dimensiones un mecanismo de fusión muy diferente, que ha sido estudiado por Halperin y Nelson (1978) sobre las ideas de Kosterlitz y Thouless para la superfluidez en dos dimensiones.

Hacia la complejidad

Los conceptos teóricos desarrollados para fluidos simples empiezan a aplicarse en la década de los 80 a las fases de cristales líquidos. La teorías de Onsager (1949) y de Maier y Saupe (1963) para la formación de fases nemáticas en líquidos de moléculas muy anisótropas (formas alargadas o aplastadas), se engloban, generalizan y mejoran dentro del formalismo del funcional de la densidad. éste también se aplica a otras fases de cristales líquidos (esmécticos, columnares) que aparecen como estadios de orden intermedio entre los líquidos y los cristales, y a sus propiedades superficiales (transiciones de anclaje, etc...) que los han convertido en elementos clave de las nuevas tecnologías para dispositivos de visualización. El premio Nobel de Física en 1991 a P. de Gennes, por sus trabajos para comprender las fases *blandas* de la materia, marca la tendencia hacia problemas como las suspensiones coloidales, los polímeros, las membranas biológicas, etc..., como objetivos actuales de la Física Estadística. La combinación de simulaciones por ordenador y de métodos teóricos desarrollados para otros problemas (desde el funcional de la densidad al grupo de renormalización), junto con las nuevas técnicas experimentales, están poniendo al alcance de la Física Estadística cada vez más problemas con interés biológico, en un campo que sin duda va a ser de enorme interés durante el presente siglo.

Dentro de la denominación de *sistemas complejos*, un término tan indefinido como frecuentemente utilizado, debemos señalar los avances en el estudio de sistemas bajo la influencia de campos externos desordenados (desde el efec-

to de impurezas en *ferromagnetos* y superconductores, a cristales líquidos en aerogeles y otros medios porosos) y en las transiciones de fase de sistemas con orden frustrado por condicionantes dinámicos (vidrios) o por la topología de las interacciones (vidrios de espín). El *método de las réplicas* fue desarrollado para el tratamiento estadístico de un *desorden congelado*, en contraposición con el *desorden termalizado* que se incluye en los colectivos estadísticos habituales. La solución de Parisi (1980) para los modelos de vidrios de espín con alcance infinito muestra cómo estos sistemas tienen un diagrama de fases con infinidad de fases de equilibrio, organizadas en una estructura jerárquica, como las hojas en las puntas de las ramas de un árbol, dando lugar a lo que se conoce como un *espacio hiper métrico*, en el que dos fases cualesquiera no tienen fases intermedias más cerca de cada una de ellas de lo que están éstas entre sí. Aunque las hipótesis del modelo resuelto por Parisi lo sitúan bastante lejos de los vidrios de espín reales, sí que pueden servir para modelar otros sistemas muy distintos, como redes neuronales y problemas de optimización o de teoría de juegos, en los que muchos elementos conectan entre sí, con vínculos que no se pueden satisfacer en su totalidad. De esta frustración de vínculos surge la necesidad de elegir cuáles se satisfacen y cuáles no, dando lugar a infinidad de posibles soluciones para un sistema que no tiene una solución óptima. La aplicación de los métodos de la Física Estadística, y en particular de los conceptos de transiciones de fases, a estos sistemas es un campo de gran actividad y se contempla en detalle en el artículo de F. Guinea, E. Louis y M. San Miguel.

El desarrollo en España

Antes de finalizar este artículo revisaremos, aunque sea brevemente, la evolución de los grupos españoles en Física Estadística de Equilibrio y Transiciones de Fase. Para nosotros es una situación muy comprometida ya que no somos historiadores de la Ciencia y no disponemos de los medios, ni del tiempo, para hacer un estudio en profundidad, por lo que pedimos por anticipado disculpas por las posibles omisiones derivadas de nuestro desconocimiento de algunos grupos y temas. En esta revisión nos circunscribiremos al estudio de los grupos teóricos, y remitimos al lector al artículo de David Jou para el análisis del contexto general en Termodinámica y de toda la componente experimental que allí se enmarca.

No hemos encontrado huella que perdure de las contribuciones de científicos españoles en este campo anteriores a 1951, cuando aparece desde Inglaterra el trabajo de Nicolás Cabrera con Burton y Frank, en el que utilizan la entonces reciente solución de Onsager para el modelo de Ising bidimensional para predecir la transición de fase de *rugosidad* (roughening) en las caras cristalinas de los sólidos, que sigue siendo un concepto básico en la física de superficies. Esto no quiere decir que no hubiese, desde mucho antes, quien estuviese en España al tanto de los desarrollos de la Física Estadística: el libro de texto de Julio Palacios, *Termodinámica y Mecánica Estadística*, publicado en 1948, presenta esta última materia de una forma tan sólida y bien estructurada que no deja duda sobre el dominio del tema por el autor. Es seguro que ya Esteban Terradas y Blas Cabrera, maestros predilectos de Palacios, siguieron de cerca el progreso que hemos tratado de relatar en la primera parte de este artículo.

Pero, como reconoce Palacios en el prólogo de su libro, los avatares históricos de todos conocidos crean unas décadas de aislamiento en las que, con muy honrosas excepciones, la actividad científica en nuestro país fue escasa.

Hay que avanzar hasta la década de 1970 a 1980 para encontrar grupos en España que se van incorporando a la investigación en Física Estadística desde distintos entornos: Termodinámica, Física del Estado Sólido, Física Teórica o Física Aplicada. Este origen mestizo y desordenado caracteriza (y enriquece) todavía hoy la estructura social de este colectivo, pero hace muy difícil plantear el desarrollo del campo de una forma coherente. Valga de ejemplo que, ni Mecánica Estadística ni Física Estadística son aún en el día de hoy palabras clave permitidas por el buscador en la base de datos TESEO para las Tesis Doctorales presentadas en nuestro país desde 1976.

En esos años, el interés por los problemas de la criticalidad no clásica y las aplicaciones del grupo de renormalización había alcanzado su cénit, mientras que problemas como las teorías para la estructura de correlación de líquidos simples estaban llegando (de forma mucho más pausada) a su madurez y las técnicas del funcional de la densidad empezaban a despuntar. También en esa época, se suscita un gran interés hacia los problemas fuera del equilibrio así como de la conexión entre la física estadística y la dinámica no-lineal, que atraen a la mayor parte de la "escuela mediterránea", nucleada en Barcelona por Garrido y Casas-Vázquez, que se extiende después desde Palma de Mallorca hasta Granada; lo mismo ocurre con el grupo que nuclea en la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) García Velarde y que posteriormente se forja en la Universidad Nacional de Educación a Distancia, así como con otros grupos en Santander, Santiago, Zaragoza, etc... En este último grupo, aunque los trabajos iniciales versan sobre propiedades magnéticas de equilibrio, evolucionan rápidamente hacia el estudio de propiedades dinámicas. A ninguno de ellos vamos a hacer referencia aquí, puesto que se salen de la parcela que nos ha sido asignada y varios de sus distinguidos miembros presentan artículos en este número.

Sí que debemos citar, por encontrarse más cerca del tema de este artículo, al grupo interdepartamental de "Simulaciones por Computador en Materia Condensada", que reúne en Barcelona a investigadores provinientes de la Termología (trabajando en disoluciones iónicas, líquidos iónicos y moleculares), así como a otros que provienen de la Física Nuclear (interesados en el estudio del helio líquido).

Del antiguo departamento dirigido por Palacios en la Universidad Complutense de Madrid (UCM) surge Juan de la Rubia, que tras su incorporación a la Universidad de Sevilla, dirige las tesis doctorales a Brey, Santos y Rull, con lo que inicia la que podríamos llamar la "escuela sevillana", que después se extenderá por Extremadura y otros sitios. Mientras que algunos miembros de la escuela se centran en problemas de teorías cinética y de no equilibrio (ver el artículo de J. Brey), Rull empieza a aplicar las técnicas de simulación por computador (complementadas con cálculos teóricos) a problemas de transiciones de fase, con relevantes resultados en líquidos simples, mezclas líquidas, y sistemas más complejos como cristales líquidos y electrolitos.

Del resto de grupos dedicados a las transiciones de fase en equilibrio, la mayor parte se originan en Madrid. En el

departamento de Química-Física de la UCM el interés de M. Díaz Peña por las teorías de celda cuaja en un grupo, nucleado alrededor de M. Lombardero y J. Santamaría que se centra en la aplicación de las ecuaciones integrales, teorías de perturbaciones y simulaciones para el estudio de las correlaciones en líquidos moleculares. En la actualidad se encuadran bajo dos de las líneas de investigación del departamento: la de “Mecánica Estadística y Simulación” y la de “Macromoléculas y Polímeros”, que han ido evolucionando hacia el estudio de sistemas cada vez más complejos.

También el grupo de “Teoría de Fluidos” del Instituto de Química-Física Rocasolano del CSIC debe considerarse parte de esta misma escuela. En la Facultad de Física de la UCM, pero ya en la década de los 80, surgen investigadores en distintos problemas de transiciones de fase: en el departamento de Física Aplicada I (Termología), con trabajos sobre líquidos y cristales líquidos, utilizando el formalismo del funcional de la densidad; y en el departamento de Física Teórica, desde la teoría cuántica de campos hacia temas que incluyen vidrios de espín. El grupo interdepartamental de “Física Estadística” creado recientemente en esa Facultad, está más orientado a fenómenos dinámicos, no lineales y a teorías de juego.

También en Madrid, en el campus de Cantoblanco, nace, a finales de los 70 bajo la dirección de G. Navascués, un grupo que en la actualidad está repartido entre el departamento de Física Teórica de la Materia Condensada (UAM) y el Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), y al que pertenecemos los autores. Inicialmente el grupo centra su interés en las propiedades superficiales de líquidos simples, moleculares y metálicos, y se beneficia de la influencia del entorno de teóricos del estado sólido. Los trabajos posteriores están fuertemente ligados al desarrollo del formalismo del funcional de la densidad, con aplicaciones a transiciones de mojado, cristalización y cristales líquidos; más tarde, pasan a incluir técnicas de simulación y aplicaciones a problemas dinámicos.

De estos grupos pioneros, en la década de los 70, surgen los investigadores que, junto a los que van apareciendo en otros centros, configuran el mapa actual de la Física Estadística de Equilibrio en España. Aparte de los ya citados y con fuerte relación inicial con la escuela sevillana, debemos mencionar al creado en el departamento de Física de la Universidad de Extremadura, principalmente interesado en la obtención de ecuaciones de estados y de funciones de correlación, así como al grupo de “Modelado Molecular” de la Universidad Rovira i Virgili, que con un marcado talante

de Ingeniería Química, estudia los diagramas de fase con técnicas de simulación y modelos teóricos. En Madrid, la línea de Física Estadística del departamento de Matemáticas de la Universidad Carlos III estudia los fluidos complejos (monocomponentes y mezclas) usando el formalismo de las funcionales de la densidad, así como otros temas que se salen de nuestro campo. En la Universidad de Salamanca, el grupo del departamento de Física Aplicada se ha centrado en el análisis de las propiedades básicas del formalismo del funcional de la densidad. En la Universidad de Valladolid, el grupo de “Simulación ab-initio de Nuevos Materiales” del departamento de Física Teórica, Atómica, Molecular y Nuclear mantiene, aprovechando la experiencia del departamento en Materia Condensada, una línea interesada en el estudio de las propiedades estructurales de líquidos simples y metálicos, tanto monocomponentes como aleaciones. En el área de Física Aplicada del departamento de Física de la Universidad de Murcia existe un grupo trabajando en distintos problemas, desde vidrios de Coulomb hasta estructuras de membranas y cristales líquidos. Por último, el grupo perteneciente al departamento de Física Aplicada de la Universidad de Cantabria viene trabajando, desde hace tiempo, en el cálculo de ecuaciones de estados para el fluido de esferas duras y para fluidos moleculares.

En la actualidad todos los grupos mencionados y aquellos ausentes por nuestro desconocimiento o por ser todavía muy recientes y estar en fase de consolidación, configuran una estructura percolante, con intereses semejantes a los de la comunidad internacional en un tema que ha ganado madurez en el lento pero firme progreso que hemos pretendido describir aquí, desde los tiempos de Boltzmann, Gibbs y van der Waals, hasta la actual *expansión hacia la complejidad*. Esta madurez nos da criterios para decidir la relevancia de los problemas y nos proporciona un importante bagaje de técnicas teóricas y de simulación para abordarlos, pero sin quitarle vitalidad a una materia en la que los retos para los futuros investigadores se multiplican con nuestros presentes esfuerzos por avanzar.

Pedro Tarazona

está en el Dpto. de Física Teórica de la Materia Condensada. Univ. Autónoma de Madrid

y Enrique Chacón

está en el Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid. CSIC

LIBROS Y PUBLICACIONES RECIBIDOS

- **Ibérica actualidad Tecnológica.** Año 84. Nº 465. 2003
- **Revista de Física Aplicada.** Sociedade Brasileira de Física. Vol. 16. Nº 1. 2003.
- **Nuclear España.** Sociedad Nuclear Española. Nº 233. 2003.
- **100cias.** Facultad de Ciencias de la UNED. Nº 6. 2003.
- **The European Physical Journal EPJ.** Vol. 24. Nº 1. 2003.
- **Physics Today.** Vol. 56. Nº 8. 2003.
- **Progress of Theoretical Physics.** Vol. 109. Nº 6. 2003.
- **Enseñanza de las Ciencias.** Revista de investigación y experiencias didácticas. Vol. 21 Nº 21 y 22. 2003.
- **Physics World.** Vol. 16. Nº 8. 2003.
- **Look Japan.** Vol. 49. Nº 571. 2003.