

El problema de la existencia de los fonones

Sebastian Fortin[†]

Hernán Accorinti[‡]

Manuel Herrera[§]

Resumen

Las discusiones sobre la estructura de la materia en filosofía de la química generalmente se abordan con el foco puesto en la estructura molecular. Sin embargo hay otro tipo de sustancias, tales como los sólidos cristalinos, que no entran en tal categoría. Para el tratamiento cuántico de estas sustancias se apela a una nueva partícula llamada fonón. Generalmente el fonón es concebido como una pseudo-partícula, es decir un artificio matemático necesario para realizar los cálculos pero que no tiene una existencia “real”. En este trabajo analizamos el estatuto ontológico de los fonones a la luz de los esquemas de emergencia y pluralismo ontológico.

1. Introducción

Las discusiones filosóficas recientes sobre la estructura de la materia generalmente se centran en los aspectos ontológicos de la estructura de los átomos en moléculas (Woolley 1978, 1982, Amann 1992, Sutcliffe y Wolley 2011, 2012, Bishop 2005, Fortin *et al.* 2017). Sin embargo, la diversidad de sustancias químicas no se agota en las moléculas, hay otro tipo de sustancias que no entran en esta categoría, como por ejemplo los cristales. El tratamiento de los cristales desde la perspectiva de la física moderna es la fuente de numerosos éxitos empíricos que sustentan a las teorías actuales. Sin embargo, este campo no ha sido muy explorado desde la perspectiva filosófica. En particular, consideramos de particular interés el análisis del estatuto ontológico de las entidades fundamentales a partir de las cuales se explican las propiedades físicas y químicas de los cristales.

Según el formalismo estándar debemos suponer que un cristal está compuesto por N unidades monoatómicas idénticas que interactúan entre sí formando una red. Mediante un adecuado cambio de variables es posible interpretar la red como una suma de osciladores armónicos (Kittel, 1998). En un paso posterior, se aplica un formalismo cuántico a esta red de osciladores armónicos resultando que su energía está cuantizada. Esto sugiere que la naturaleza de dichas ondas sea similar a la del campo electromagnético que en mecánica cuántica se representa mediante los fotones. Dentro de este formalismo surge la idea del fonón. Un fonón es un cuanto de vibración (o sonido), una partícula análoga a fotón. De este modo se puede abandonar el modelo del sólido basado en las unidades monoatómicas oscilantes y pensar en un modelo según el cual los átomos de la red están fijos y las vibraciones están representadas por partículas llamadas fonones. Así la energía vibracional del sólido se piensa como la suma de la energía de los fonones que hay en él. Generalmente el fonón es concebido como una pseudo-partícula, es decir un artificio matemático

[†] CONICET-Universidad de Buenos Aires. Para contactar al autor, por favor, escribir a: sfortin@conicet.gov.ar.

[‡] FONCyT-Universidad de Buenos Aires. Para contactar al autor, por favor, escribir a: hernanaccorinti@gmail.com.

[§] CONICET-Universidad de Buenos Aires. Para contactar al autor, por favor, escribir a: herrera.aros@gmail.com.

necesario para realizar los cálculos pero que no tiene una existencia “real”. En este trabajo cuestionaremos esta concepción del fonón y estudiaremos la posibilidad de concebirlo como una partícula física con un estatuto ontológico igual al del fotón. Para ello, en la Sección 2 resumiremos brevemente la forma en que usualmente se entienden los cristales. Veremos que para dar cuenta de ciertos fenómenos es necesario introducir una nueva partícula, el fonón. En la Sección 3, presentaremos algunos ejemplos que fundamenta la importancia del fonón a nivel explicativo y predictivo. En la Sección 4 discutiremos los argumentos que se esgrimen a la hora de negar al fonón su estatuto de partícula fundamental. En la Sección 5, discutiremos la posibilidad de aplicar un esquema pluralista al caso de los fonones. Finalmente presentamos nuestras conclusiones.

2. La descripción interna de los cristales

Generalmente a los sólidos se los entiende como a un grupo de partículas o unidades que se encuentran unidas por medio de algún tipo de interacción. Por simplicidad, en este trabajo consideraremos sólo al caso más simple, los cristales monoatómicos, es decir los cristales cuyas unidades están compuestas por un solo átomo. Un cristal real es entendido como una red perfectamente ordenada en 3 dimensiones. Sin embargo, en este trabajo consideraremos sólo modelos en una dimensión ya que la generalización a 3 dimensiones es inmediata. Entonces el modelo más simple de un sólido es una cadena infinita unidimensional de átomos unidos por medio de algún tipo de interacción. Dado que la cadena es infinita y todos sus eslabones son átomos idénticos, tiene simetría de traslación discreta y aplicando el principio de razón suficiente podemos deducir que los átomos son equidistantes en el estado de equilibrio. Cuando se aparta un átomo de su posición de equilibrio, entonces aparecerá una fuerza restitutiva que tienda a restaurar la posición de equilibrio de dicho átomo. La fuerza restitutiva más simple es proporcional a la distancia, como en un resorte. Si u_s es la variable que representa la posición de la partícula s , y dado que esta partícula se encuentra ligada a sus vecinas $s+1$ y $s-1$, entonces la fuerza sobre ella será

$$F_s = C(u_{s+1} - u_s) - C(u_s - u_{s-1}) \quad (1)$$

donde C es una constante de proporcionalidad. Para obtener las ecuaciones de movimiento de los átomos del cristal utilizamos la segunda ley de Newton. Como resultado de la aplicación de esta ley, si en total tenemos N átomos en la cadena, se obtienen N ecuaciones diferenciales acopladas. Al resolverlas es posible hallar, dadas las condiciones iniciales, la expresión matemática que describe el movimiento de cada átomo en el tiempo. Los detalles no son muy importantes pero lo que sí queremos destacar es la imagen que nos ofrece este modelo acerca de la dinámica de los sólidos. Los átomos están unidos por medio de una interacción que les permite vibrar. Entonces las vibraciones en la red cristalina forman ondas que se propagan a través del cristal. Estas son las llamadas ondas acústicas, responsables de la transmisión del sonido. Por otro lado, la concepción microscópica del calor también está asociada a estas ondas. La temperatura de un cristal está dada, en gran medida, por la energía cinética de los núcleos que lo componen. Es decir, en esta concepción el calor y la temperatura es una manifestación macroscópica de las

vibraciones internas de la red. Entonces, en este caso, el sonido y la temperatura son transportados por medio de ondas.

2.1 El tratamiento cuántico de los cristales

La descripción a través de las leyes de Newton no es suficiente para explicar el comportamiento de las propiedades de los cristales en función de la temperatura. La evidencia empírica sugiere que las vibraciones están cuantizadas, motivo por el cual resulta necesario cuantizar el modelo. El Hamiltoniano \hat{H} del sistema resulta

$$\hat{H} = \sum_{s=1}^N \frac{1}{2m} \hat{p}_s^2 + \frac{C}{2} (\hat{q}_{s+1} - \hat{q}_s)^2 \quad (2)$$

donde \hat{p}_s y \hat{q}_s son los operadores de momento y de posición de la partícula s , y \hat{q}_{s+1} es el operador de posición de la partícula $s+1$. Dada la cantidad de partículas en un cristal resolver el Hamiltoniano así como está resulta imposible. Sin embargo es posible realizar un cambio de coordenadas especialmente elegido para simplificar el cálculo utilizando las coordenadas fonónicas. En estas coordenadas el Hamiltoniano queda escrito como una suma de osciladores armónicos que no interactúan. Luego es posible cambiar al formalismo en términos de operadores de creación y destrucción desarrollada para el oscilador armónico (Sakurai, 1994). En este formalismo las vibraciones son representadas como partículas que se crean y se destruyen. Así, podemos escribir al Hamiltoniano como

$$\hat{H} = \sum_k \hbar \omega_k \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \right) \quad (3)$$

donde \hat{a}_k^\dagger es el operador de creación y \hat{a}_k el de destrucción. Si bien este Hamiltoniano es igual al Hamiltoniano original de la expresión (2), en esta representación ya no aparecen los átomos que introdujimos originalmente en la cadena. La nueva expresión representa a un nuevo tipo de partícula que llamaremos fonón. Entonces dejamos de lado el modelo original en donde un cristal estaba representado por medio de una cadena de átomos unidos entre sí por medio de una interacción, para pasar a un modelo donde no hay átomos en movimiento, sino fonones. A su vez, la energía total del cristal E es la suma de la energía de los fonones más una energía de “vacío” que se puede asociar a la energía de la red cuando no hay ningún fonón, es decir cuando la red está quieta.

3. Explicación y predicción a través de los fonones

Como se adelantó en la introducción, el estudio del comportamiento de los fonones forma una parte importante en el estudio de las propiedades de las sales y los sólidos cristalinos en general. Esto se debe a que desempeñan una función central en la explicación de sus propiedades físicas y químicas. A modo ilustrativo, presentamos aquí dos ejemplos simples en los que se puede apreciar el poder explicativo del fonón.

3.1 La ecuación del calor

En la descripción de los sólidos cristalinos basados en fonones, la temperatura de un sólido está dada por la presencia de fonones, cuanto mayor sea la densidad de fonones en una zona, mayor será la temperatura en ese lugar.

Sea una barra metálica a la que se calienta un extremo, por ejemplo iluminándolo, y se le enfría el otro, por ejemplo con agua. Entonces, aparece un flujo neto de calor entre los extremos de la barra que produce un gradiente de temperatura. Si aplicamos el modelo de fonones a este caso, entonces la descripción indica que en el extremo caliente hay una fuente de fonones, entonces los fonones viajan a través de la barra metálica. Los fonones viajan colisionando unos contra otros, por lo que se trata de un proceso de difusión que termina con los fonones saliendo por el extremo frío, donde hay un sumidero de fonones.

De esta manera, los fonones ofrecen, a nivel explicativo, una imagen del flujo de calor y la temperatura basada en partículas. Dicha imagen es simple y muy efectiva, al menos más efectiva que la imagen abstracta del calor que ofrece la termodinámica. De hecho, resulta sorprendente que la aplicación de la mecánica cuántica a los sólidos cristalinos termine recuperando una concepción del calor similar a la que desarrollara Lavoisier en el siglo XIII con su teoría del calórico (Best, 2016). En efecto los fonones son una versión moderna y cuantizada de la noción de la *sustancia del calor*, al menos a nivel explicativo. En el nivel matemático su efectividad se hace patente al permitir deducir la bien conocida ecuación del calor. Esto se logra, aplicando el modelo de fonones del siguiente modo. Si la dirección longitudinal de la barra es la dirección x , entonces aplicando la teoría cinética al caso de los fonones, teniendo en cuenta los choques, se obtiene que el flujo neto de energía a lo largo de la barra es (los detalles de la deducción se pueden ver en Ashcroft & Mermin, 1976)

$$j_U = -\frac{1}{3} C v l \frac{dT}{dx} \quad (4)$$

donde C es la capacidad térmica por unidad de volumen, v es la velocidad media de las partículas, l el recorrido libre medio de un fonón entre colisiones y la expresión es la conocida ecuación del calor.

3.2 La capacidad calorífica

Otro ejemplo interesante es el cálculo de la capacidad calorífica de los sólidos. En este caso consideraremos un cristal aislado sin fuentes ni sumideros de fonones de modo que podremos suponer que los fonones que haya se encuentran confinados dentro del cristal. De este modo podemos modelar al sistema como un gas ideal de fonones confinados en una caja. Así, la energía total del cristal se puede escribir como la suma de la energía de cada uno de los fonones

$$E = \sum_m \varepsilon^m \langle n_m \rangle \quad (5)$$

donde $\langle n_m \rangle$ es el número de ocupación medio para fonones de energía ε^m y está dado por la distribución de Planck. Debido a la complejidad del cálculo de la capacidad calorífica $C_{cristal}$ se suelen aplicar algún tipo de aproximación. En el caso de bajas temperaturas se utiliza la aproximación de Debye y el resultado es proporcional al cubo de la temperatura (para los detalles de la deducción ver Kittel, 1998)

$$C_{cristal} \propto T^3 \quad (6)$$

En el caso de altas temperaturas se utiliza la aproximación de Einstein, donde la capacidad térmica resulta

$$C_{cristal} \propto \frac{1}{T^2} \frac{e^{\frac{h\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{h\omega}{k_B T}} - 1 \right)^2} \quad (7)$$

Estos resultados teóricos solapan muy bien con los resultados medidos en el laboratorio, lo que constituye un éxito del modelo de fonones.

4. El estatuto ontológico de los fonones

A la hora de ofrecer una imagen y una matemática que describa la composición de las sustancias químicas, sin duda el modelo más popular es el que ofrece la hipótesis atómica usual. Es decir, el modelo según el cual, la materia está compuesta por átomos. Así, para aplicar la mecánica cuántica a una sustancia química debemos construir su Hamiltoniano como el Hamiltoniano de estos átomos más un Hamiltoniano de interacción

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{átomos}} + \hat{H}_{\text{int}} \quad (8)$$

Con este Hamiltoniano más la aplicación de alguna aproximación que simplifique los cálculos, podemos explicar y predecir muchos fenómenos en la naturaleza. Por ejemplo, podemos calcular los niveles energéticos de una molécula (Sutcliffe & Wolley, 1012).

Por otro lado, en las secciones anteriores presentamos una ontología diferente para el caso de la materia en estado sólido basada en la hipótesis fonónica. De acuerdo con las ideas allí expuestas, los sólidos se componen por átomos que se encuentran en reposo y fonones que se pueden mover. A su vez, con el Hamiltoniano de estos fonones más algún Hamiltoniano de interacción es posible explicar y predecir algunos fenómenos de la naturaleza, como por ejemplo la ecuación del calor.

A pesar de que por medio de ambas hipótesis se obtiene algún nivel de éxito empírico, en la comunidad científica prevalece la preferencia por la hipótesis atómica usual por sobre la fonónica. Tanto científicos como filósofos generalmente conciben al fonón como una pseudo-partícula, es decir un artilugio matemático necesario para simplificar los cálculos pero que no tiene una existencia "real" (Ashcroft, 1976). En esta sección indagaremos los motivos por los cuales se degrada el estatuto ontológico del fonón y argumentaremos en favor de la consideración del fonón entre las partículas constituyentes de la materia.

4.1 Fonones y fotones

En la Sección 2 mostramos que mediante una serie de cálculos es posible partir del Hamiltoniano de un sistema conformado por átomos que se pueden mover interactuando a primeros vecinos y llegar al Hamiltoniano de un sistema de fonones:

$$\hat{H}_{\text{átomos}} + \hat{H}_{\text{int}} \xrightarrow{\text{Coordenadas fonónicas}} \sum_m \frac{1}{2} (\hat{P}_m^2 + \omega_m^2 \hat{Q}_m^2) \xrightarrow{\text{op. creación y destrucción}} \sum_m \hbar \omega_m \left(\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \frac{1}{2} \right) \quad (9)$$

donde $\hat{H}_{\text{átomos}} = \sum_{s=1}^N \frac{1}{2m} \hat{p}_s^2$ y $\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{s=1}^N \frac{C}{2} (\hat{q}_{s+1} - \hat{q}_s)^2$. En este punto es interesante señalar que dichos cálculos son exactamente los mismos que utilizamos para hallar el Hamiltoniano de los fotones partiendo del Hamiltoniano del campo eléctrico \hat{H}_E y magnético \hat{H}_B :

$$\hat{H}_E + \hat{H}_B \xrightarrow{\text{Coordenadas fotónicas}} \sum_m \frac{1}{2} (\hat{P}_m^2 + \omega_m^2 \hat{Q}_m^2) \xrightarrow{\text{op. creación y destrucción}} \sum_m \hbar \omega_m \left(\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \frac{1}{2} \right) \quad (10)$$

La analogía entre fotones y fonones es completa, por un lado, en el plano matemático los cálculos utilizados para describir al fotón son exactamente los mismos que los utilizados para describir al fonón. Desde el punto de vista explicativo, el procedimiento de la expresión (10) nos permite entender a todas las formas de radiación electromagnética, por ejemplo, la luz, como partículas. Del mismo modo el procedimiento de la expresión (9) nos permite entender a todas las formas de vibración en un cristal como partículas. Entonces, la temperatura o el sonido en un cristal son manifestaciones de la presencia de los fonones.

Debido al éxito empírico los fotones son considerados como partículas reales y tanto físicos como filósofos los estudian sin dudar de que se trata de partículas que pueblan el mundo físico. Teniendo en cuenta que en el caso de las vibraciones de un cristal se realizan exactamente los mismos cálculos, y que también se obtiene un éxito empírico como el que se describe en la Sección 3, cabría esperar que los fonones también sean considerados como partículas que pueblan el mundo físico. Sin embargo, normalmente se considera que los fonones no son partículas reales sino cuasipartículas (Franklin & Knox, 2018; Ladyman, 2015). Es decir, una mera herramienta matemática útil para simplificar los cálculos, pero sin una ontología propia.

Por lo expuesto aquí, el tratamiento diferente brindado a fonones y fotones no puede estar justificado en el formalismo matemático ni en el éxito empírico, sino que debe tener otro origen. Si se indaga sobre las razones por las cuales los fonones no son considerados partículas reales, sino cuasipartículas, es posible identificar una serie de razones.

4.2 Los fonones se derivan de los átomos

En primer lugar, se puede señalar que los fonones son una mera herramienta de cálculo. Según lo expuesto en la Sección 2, para introducir los fonones se plantea una cadena de átomos que se pueden mover utilizando la hipótesis atómica usual. Las ecuaciones que resultan de este modelo no se pueden resolver directamente, por eso se realizan una serie de cambios de variable para

simplificar los cálculos y ahí aparecen los fonones. Entonces la forma en que son presentados los fonones sugiere que son sólo una herramienta que permite simplificar los cálculos. Pero una sugerencia no es un argumento concluyente, veamos por qué.

En efecto, los fonones son introducidos partiendo del modelo de una cadena de átomos que vibran. Esa es la estrategia que hemos elegido en la Sección 2 y es la forma en que aparecen los fonones en los libros de texto sobre el tema (ver Ashcroft & Mermin, 1976 y Kittel, 1998). Sin embargo debemos señalar que esto se hace así por cuestiones didácticas. Dado que el lector típico está familiarizado con la idea de un átomo que se puede mover, se parte de un modelo basado en ellos. No obstante todos esos cálculos no son necesarios. Siempre es posible presentar a los fonones postulando la existencia de esta nueva partícula con el Hamiltoniano

$$\hat{H} = \sum_k \hbar \omega_k \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \right) \quad (11)$$

De hecho esta es la forma en que se suele trabajar con fonones. Nadie realiza la deducción de los fonones cada vez que quiere estudiar un fenómeno térmico en un cristal, por el contrario, se parte de la existencia de los fonones. Cuando queremos usar fonones para describir algún fenómeno en un cristal partimos del Hamiltoniano (3) e introducimos algún término de interacción si es que lo necesitamos. Un ejemplo que ilustra este hecho es el experimento de Shinen 1963, donde se estudia un proceso de scattering entre fonones. En este experimento hay un fonón con frecuencia ω_1 que choca con un fonón de frecuencia ω_2 en un proceso de scattering donde se conserva la energía produciendo un tercer fonón de frecuencia $\omega_1 + \omega_2$. El proceso de scattering debe darse a través de algún tipo de interacción entre los fonones, es decir al Hamiltoniano de los fonones debe agregarse un Hamiltoniano de interacción

$$\hat{H} = \sum_k \hbar \omega_k \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \right) + \hat{H}_{\text{int}} = \hat{H}_{\text{fonones}} + \hat{H}_{\text{int}} \quad (12)$$

Este Hamiltoniano de interacción es el que tiene interpretación directa, en efecto describe la interacción entre fonones que se mide en el experimento. Así, la planificación del experimento y la interpretación de los resultados se realizan en términos de fonones. El cálculo que permite interpretar este experimento en término de ondas se realiza a posteriori y no representa ninguna ventaja explicativa ni computacional. Un ejemplo similar se puede encontrar en Kong *et al.*, 2001, donde se calcula el acoplamiento fonón-electrón en cristales de boruro de magnesio.

Entonces podemos descartar el argumento según el cual los fonones se derivan de los átomos ya que, en primer lugar, esto sólo ocurre cuando los fonones no interactúan, en el caso con interacción esta derivación no existe. En segundo lugar, en el trabajo científico cotidiano se parte de la existencia de los fonones y se utilizan constantemente para interpretar los experimentos, para determinar los términos de interacción sin derivación alguna.

4.3 No son necesarios en caso de tener una supercomputadora

Luego de reconocer que los fonones no se derivan de los átomos en el caso donde hay interacción es posible apelar a otro argumento en contra de la existencia de los fonones, alegando que nos

vemos obligados a utilizar a los fonones porque aún no tenemos poder de cómputo suficiente como para resolver la ecuación de Schrödinger de una red cristalina desde primeros principios. Pero en el futuro, cuando dispongamos de computadoras más poderosas podremos realizar los cálculos sin apelar a los fonones. Según este argumento, los fonones son herramientas de cálculo que podrán ser descartadas cuando dispongamos de poder de cómputo suficiente como para poder resolver la ecuación de Schrödinger de los cristales desde primeros principios. Veamos esto con un poco más de detalle.

Sea un sistema cuántico U , de acuerdo con la mecánica cuántica el sistema tiene asociado un Hamiltoniano \hat{H}_U . Luego, existen muchas formas de dividir al sistema U en partes. En particular siempre es posible sumar y restar el Hamiltoniano que uno elija, por ejemplo \hat{H}_X de manera que el Hamiltoniano original resulte inalterado

$$\hat{H}_U = \hat{H}_X - \hat{H}_X + \hat{H}_U = \hat{H}_X + \hat{H}_{\text{int}} \quad (13)$$

donde $\hat{H}_{\text{int}} = -\hat{H}_X + \hat{H}_U$. Este es un procedimiento sumamente artificial pero correcto, que muestra que a cualquier Hamiltoniano siempre lo podemos escribir como el Hamiltoniano que uno elija más algún término de interacción. El hecho de que esto se pueda hacer siempre no significa que siempre sea útil, como veremos más adelante.

De lo anterior podemos concluir que dado un sistema cuántico es posible representar su Hamiltoniano como el Hamiltoniano de átomos móviles más uno de interacción, $\hat{H}_U = \hat{H}_{\text{átomos}} + \hat{H}_{\text{int}}$. O bien representar al sistema como el Hamiltoniano de los fonones más uno de interacción distinto al del caso anterior, $\hat{H}_U = \hat{H}_{\text{fonones}} + \hat{H}'_{\text{int}}$. Es importante notar que estos dos Hamiltonianos son exactos, ya que no hemos realizado ningún tipo de aproximación. En el caso hipotético de disponer de una supercomputadora que nos permita encontrar las soluciones para sistemas de muchas ecuaciones entonces podríamos usarla, como dice el argumento que estamos considerando, para resolver el modelo que usa la hipótesis atómica usual y, por ejemplo, calcular el valor medio de algún observable, \hat{O} . Sin embargo nada impide que utilicemos la misma supercomputadora para resolver el Hamiltoniano de los fonones y calcular el valor medio del mismo observable. De hecho obtendremos exactamente el mismo resultado

$$\langle \hat{O} \rangle_{\text{átomos}} = \langle \hat{O} \rangle_{\text{fonones}} \quad (14)$$

Esto se debe a que ambas son soluciones exactas del mismo Hamiltoniano escrito de maneras distintas. Entonces debemos descartar el argumento de la supercomputadora, porque si disponemos de ella podemos describir cualquier sistema con cualquiera de los dos modelos obteniendo exactamente el mismo resultado. La supercomputadora es neutral en esta discusión.

4.4 La magnitud del éxito empírico

Luego de reconocer que en el caso general los fonones no se derivan de los átomos y que en caso de disponer de una supercomputadora podríamos describir todo el mundo a base de fonones es posible apelar a un último argumento basado en la magnitud del éxito empírico. La hipótesis atómica usual es muy exitosa a la hora de explicar una larga serie de fenómenos de la naturaleza mientras que con los fonones sólo podemos explicar algunos fenómenos. Por una cuestión de capacidad explicativa, ambas hipótesis no están en el mismo nivel. Según este argumento, los fonones no están al mismo nivel que los átomos móviles porque estos últimos explican una gran cantidad de fenómenos mientras que los primeros sólo explican algunos.

Volvamos al ejemplo de la sección anterior en donde podemos escribir el Hamiltoniano de cualquier sistema en acuerdo con ambas hipótesis

$$\hat{H}_U = \hat{H}_{\text{átomos}} + \hat{H}_{\text{int}} = \hat{H}_{\text{fonones}} + \hat{H}'_{\text{int}} \quad (15)$$

Habíamos visto que si disponemos de una supercomputadora entonces podemos calcular las soluciones exactas en ambos casos, obteniendo los mismos resultados. Pero ¿Qué pasa si no tenemos la supercomputadora?

Bueno, si no tenemos la supercomputadora entonces tendremos que emplear algún tipo de aproximación. Las aproximaciones más comunes son siempre variantes de la Teoría de Perturbaciones (Ballentine, 1990). Para aplicar esta aproximación al caso del Hamiltoniano de los átomos móviles es necesario pedir que $\hat{H}_{\text{átomos}} \gg \hat{H}_{\text{int}}$, si este requisito se cumple, entonces podremos aproximar las soluciones y calcular el valor medio de algún observable \hat{O} . Por otro lado para poder aplicar la teoría de perturbaciones al caso del Hamiltoniano de los fonones es necesario pedir que $\hat{H}_{\text{fonones}} \gg \hat{H}'_{\text{int}}$, si este requisito se cumple, entonces podremos aproximar las soluciones y calcular el valor medio del mismo observable \hat{O} . En este caso el resultado no es el mismo

$$\langle \hat{O} \rangle_{\text{átomos}} \neq \langle \hat{O} \rangle_{\text{fonones}} \quad (16)$$

Esto se debe a que se trata de soluciones aproximadas y por lo tanto una solución es mejor que la otra. Para ser más precisos, es necesario aclarar que en general no podremos aplicar la teoría de perturbaciones a los dos Hamiltonianos ya que los requerimientos $\hat{H}_{\text{átomos}} \gg \hat{H}_{\text{int}}$ y $\hat{H}_{\text{fonones}} \gg \hat{H}'_{\text{int}}$, en general, no pueden ser satisfechos al mismo tiempo. Entonces, en el caso general podremos aplicar un modelo o el otro, pero no los dos.

Entonces si bien en un caso real sin una supercomputadora que nos asista, la hipótesis atómica usual resulta exitosa en muchos casos, hay una parte de la realidad donde el modelo que de ella se deriva no funciona. En el caso de procesos térmicos, debemos usar la hipótesis fonónica, no por capricho, sino por necesidad. No importa que la lista de zonas de la realidad donde se pueden aplicar los átomos móviles sea más larga que la de los fonones, ellos se complementan. Cuando uno no puede aplicarse, se aplica el otro. Entonces es posible descartar este último argumento.

5. Opciones para la ontología de un cristal

Las consideraciones presentadas hasta aquí parecen apoyar la idea de que el estatuto ontológico que se le da a los fonones ha sido devaluado en forma injustificada. Por otro lado, tampoco puede negarse la importancia de los átomos móviles a la hora de explicar los distintos experimentos. Retomando la situación descrita en la sección anterior es posible afirmar que con la hipótesis de los átomos móviles podemos explicar algunos fenómenos y con la hipótesis fonónica podemos explicar otros. En el caso de tener a disposición una supercomputadora entonces podríamos utilizarla para describir cualquier sistema con el modelo de los átomos móviles. Pero también podríamos utilizarla para describirlos con el modelo de los fonones. En este caso ambas descripciones son válidas. Por otro lado, si no disponemos de una supercomputadora, entonces es posible utilizar el modelo de átomos móviles para describir algunos sistemas y el modelo fonónico para describir otros. En este caso también ambas descripciones son válidas, cada una en su ámbito de aplicación. En resumen, todos los casos nos conducen a aceptar que ambas descripciones de la realidad son válidas y no hay argumentos para prescindir de alguna de ellas. Esto nos conduce a plantear la posibilidad de introducir algún tipo de pluralismo ontológico.

Podemos llevar nuestro análisis más lejos al notar que el argumento basado en una hipotética supercomputadora es sumamente artificial y que no hay perspectiva de que vayamos a disponer de un artefacto como ese en un futuro cercano. Por lo pronto no hay ninguna supercomputadora y si nos proponemos hacer una filosofía de la ciencia tal y como funciona en la actualidad entonces debemos admitir que el modelo de los átomos móviles resulta efectivo en una porción de la realidad mientras que el modelo basado en fonones resulta efectivo en otra. Por lo tanto este no es un caso de indeterminación de la teoría por los datos, sino un caso legítimo de pluralidad de ontologías en el ámbito de las sustancias materiales.

Es importante señalar que no es la primera vez que se plantea un pluralismo ontológico en la filosofía de la química. De acuerdo con una visión reduccionista tradicional, a pesar de su eficacia científica, la ontología química cuántica es una apariencia que surge de una descripción aproximada del mundo cuántico. Sin embargo, la posición reduccionista enfrenta varias dificultades, en general derivadas del hecho de que supuestos incompatibles, provenientes de la química estructural y la mecánica cuántica, coexisten en la química cuántica y constituyen el cuerpo teórico de la nueva disciplina (Lombardi, 2014; Fortin, Lombardi y Martínez González 2017, 2018, 2019). Ya ha sido planteado por Lombardi y Labarca (2005) que debe aceptarse que hay una ontología química cuántica, es decir, la referencia particular de la química cuántica, que es esencialmente diferente de la ontología de la mecánica cuántica. Esta independencia de la química cuántica como teoría independiente trae consigo una ontología basada entidades distintas, como por ejemplo los orbitales, que tienen una referencia precisa en esta disciplina pero no en física. Quizás el fonón pueda pasar a considerarse una de las entidades fundamentales de la química cuántica, junto con el orbital, en tanto resulta necesaria para explicar el comportamiento de los cristales.

6. Conclusiones

Es este trabajo analizamos el estatuto ontológico del fonón. Por un lado mostramos que el formalismo matemático que describe a los fonones es exactamente el mismo que describe a los fotones, y dado que ambos tienen éxito empírico deberían tener el mismo tratamiento ontológico. Entonces una primera posibilidad consiste en negar la existencia de ambos. En efecto, el holismo de la mecánica cuántica da lugar a la interpretación de los sistemas cerrados según la cual el único sistema cuántico legítimo es el todo mientras que las partes no deben considerarse entidades independientes (Fortin y Lombardi, 2014). En el caso de no querer descartar al fotón, también debería aceptarse al fonón.

Por otro lado descartamos tres argumentos que suelen utilizar los físicos para descartar la posibilidad de tomar al fonón como algo más que una herramienta matemática, concluyendo que: (i) en el caso general no se pueden derivar los fonones a partir de los átomos; (ii) En caso de poseer infinito poder de cálculo tanto la descripción basada en fonones como la basada en átomos resultan exitosas y equivalentes; y (iii) En caso de no poseer infinito poder de cálculo, la utilización de la teoría de perturbaciones obliga al tratamiento basado en fonones para algunas porciones de la realidad y al basado en átomos en otra porción. Lo cual sugiere la introducción de algún tipo de pluralismo ontológico.

Bibliografía

- Amann, A. Must a molecule have a shape? *South African Journal of Chemistry* **45**: 29-38, 1992.
- Ashcroft, N. W. & Mermin, N. D. *Solid State Physics*. Orlando: Harcourt College Publishers, 1976.
- Ballentine, L. *Quantum Mechanics*. Harlow: Prentice-Hall, 1999.
- Best, N. Lavoisier's "Reflections on phlogiston" II: on the nature of heat. *Foundations of Chemistry* **18**: 3-13, 2016.
- Bishop, R. Patching physics and chemistry together. *Philosophy of Science* **72**: 716-722, 2005.
- Fortin, S. & Lombardi, O. Partial traces in decoherence and in interpretation: What do reduced states refer to? *Foundations of Physics* **44**: 426-446, 2014.
- Fortin, S., Lombardi, O. & Martínez González, J. C. The relationship between chemistry and physics from the perspective of Bohmian mechanics. *Foundations of Chemistry* **19**: 43-59, 2017.
- Fortin, S., Lombardi, O. & Martínez González, J. C. A new application of the modal-Hamiltonian interpretation of quantum mechanics: the problem of optical isomerism. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **62**: 123-135, 2018.
- Fortin, S., Lombardi, O. & Martínez González, J. C. Why molecular structure cannot be strictly reduced to quantum mechanics. *Foundations of Chemistry* **21**: 31-45, 2019.
- Franklin, A. & Knox, E. Emergence Without Limits: The Case of Phonons. *Studies in History and Philosophy of Science* **64**: 68-78, 2018.
- Kittel, C. *Introducción a la física del estado sólido*. Barcelona: Reverté, 1998.
- Kong, Y., Dolgov, O. V., Jepsen, O. & Andersen, O. K. Electron-phonon interaction in the normal and superconducting states of MgB₂. *Physical Review B* **64**: 020501, 2001.
- Labarca, M. & Lombardi, O. Why orbitals do not exist? *Foundations of Chemistry* **12**: 149-157, 2010.

Ladyman, J. Are there Individuals in Physics, and If So, What Are They? In: Guay, A. & Pradeu, T. (eds.). *Individuals across the Sciences*. Oxford: University Press, 2015. Pp. 192-206.

Lombardi, O. & Labarca, M. The ontological autonomy of the chemical world. *Foundations of Chemistry* **7**: 125-148, 2005.

Lombardi, O. Linking chemistry with physics: arguments and counterarguments. *Foundations of Chemistry* **16**: 181-192, 2014.

Sakurai, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. Revised Edition. New York: Addison-Wesley, 1994.

Shinen, N. S. Nonlinear acoustic interaction in MgO at 9 Gc/sec. *Physical Review Letters* **11**: 3-6, 1963.

Sutcliffe, B. T. & Woolley, R. G. A comment on Editorial 37. *Foundations of Chemistry* **13**: 93-95, 2011.

Sutcliffe, B.T. & Wolley, R. G. Atoms and molecules in classical chemistry and quantum mechanics. In: Hendry, R. F. & Woody, A. (eds.). *Handbook of Philosophy of Science. Vol. 6. Philosophy of Chemistry*. Oxford: Elsevier, 2012. Pp. 387-426.

Woolley, R. G. Must a molecule have a shape? *Journal of the American Chemical Society* **100**: 1073-1078, 1978.

Woolley, R. G. Natural optical activity and the molecular hypothesis. *Structure and Bonding* **52**: 1-35, 1982.