



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

Unidad Iztapalapa

División de Ciencias Básicas e Ingeniería.

***“Teoría de Información Cuántica
como lenguaje conceptual en Química”***

**Tesis para obtener el grado de:
Doctor en Ciencias (Química)**

**Presenta:
I.BQ. Nelson Flores Gallegos
Diciembre del 2009**

**Este trabajo se llevo a cabo en el
Área de Química Cuántica bajo la asesoría del:
Dr. Rodolfo O. Esquivel Olea.**

Índice general

Lista de publicaciones	2
Resumen	4
1. Introducción	7
2. ¿Qué es la información y cómo se mide? La generalización de los conceptos	11
3. Complejidad y Teoría de Información	15
4. Teoría Clásica de la Información	21
5. Teoría Cuántica de la Información	25
5.1. Los teoremas de Einstein, Podolsky, Rosen (EPR) y de Bell	27
5.2. Estados puros y no puros	31
5.3. Entropía de von Neumann	33
5.4. Transformaciones locales y globales en la Química	37
5.4.1. Transformaciones locales: Esquemas de átomos en moléculas (AIM)	39
5.4.2. Transformaciones globales en la Química	45
5.4.3. Probabilidades atómicas	45
5.4.4. Entropías de von Neumann marginales tipo H	49
5.4.5. Entropías de von Neumann no marginales tipo R	51
6. Caracterización de las entropías marginales y no marginales	55
7. Caracterización de sistemas químicos	67
7.1. Correlación química: Entrelazado atómico	67
7.2. Las medidas de entrelazado y su relación con la dureza y la blandura	71
8. Caracterización de procesos químicos	75
8.1. Disociación del Cl_2	77
8.2. Disociación del HCl	83
8.3. Disociación del Na_2	91
8.4. Reacción S_N2 : $H^- + CH_4 \longrightarrow CH_4 + H^-$: Entropías cuánticas marginales y no marginales	103

8.4.1. Resultados del condicionamiento $\{B\} = CH_3$, y $\{A\} = H_{in}^- H_{out}$:	
Entropías tipo H	105
8.4.2. Resultados del condicionamiento $\{B\} = CH_3$, y $\{A\} = H_{in}^- H_{out}$:	
Entropías tipo R	111
8.4.3. Resultados del condicionamiento $\{B\} = CH_3 H_{in}^-$ y $\{A\} = H_{out}$:	
Entropías tipo H	115
8.4.4. Resultados del condicionamiento $\{B\} = CH_3 H_{in}^-$ y $\{A\} = H_{out}$:	
Entropías tipo R	119
8.5. Reacción S_N2 : $H^- + CH_4 \longrightarrow CH_4 + H^-$:	
Medidas de información clásicas y complejidad	131
9. Conclusiones	139
10. Perspectivas	143
A. Esquema de cálculo de las entropías H y R	147
B. Propiedades escalares	155
B.1. El potencial electrostático molecular	155
B.2. El laplaciano de la densidad	157
Glosario	158
Bibliografía	160

Lista de publicaciones

Cuando el tiempo es adecuado para ciertas cosas, esas cosas aparecen en diferentes lugares, como las violetas al principio de la primavera.

Wolfgang Bolyai.

1. Nelson Flores-Gallegos and R. O. Esquivel. *von Neumann entropies analysis in Hilbert space for the dissociation processes of homonuclear and heteronuclear diatomic molecules*. Journal of the Mexican Chemical Society, Vol. 52(1):17-28 (2008).
2. E. Carrera, Nelson Flores-Gallegos, and R. O. Esquivel. *Natural atomic probabilities in quantum information theory*. Journal of Computational and Applied Mathematics Vol. 233: 1483-1490, (2010).
3. R. O. Esquivel, N. Flores-Gallegos and E. Carrera. *von Neumann Entropies Analysis of Nanostructures: PAMAM Dendrimers of Growing Generation*. NSTI-Nanotech, Vol. 3: 701-704 (2008).
4. R. O. Esquivel, N. Flores-Gallegos, E. M. Carrera, J. S. Dehesa, J. C. Angulo, J. Antolín and C. Soriano-Correa. *Theoretic-information entropies analysis of nanostructures: ab initio study of PAMAM precursors and dendrimers G0 to G3*. Molecular Simulation. Vol. 35(6): 498-511 (2009).
5. Rodolfo O. Esquivel, Nelson Flores-Gallegos, Edmundo Carrera, and Catalina Soriano-Correa. *Ab initio study of selected PAMAM dendrimers: von Neumann entropies analysis*. Journal of Nano Research. Aceptado (2009).
6. Rodolfo O. Esquivel, Nelson Flores-Gallegos, Cristina Iuga, Edmundo Carrera, Juan Carlos Angulo, Juan Antolín. *Phenomenological description of the transition state, and the bond breaking and bond forming processes of selected elementary chemical reactions: An information theoretic study*. Theoretical Chemistry Accounts. Vol. 124: 445-460 (2009).

Resumen

Hasta hace relativamente poco tiempo la preocupación acerca de la caracterización de los sistemas físicos giraba en torno a averiguar cómo evolucionarían con el tiempo. Para caracterizar estos sistemas de una manera adecuada fueron surgiendo conceptos, magnitudes, para representarlos sin necesidad de referirnos directamente a ellos. Sin embargo, aunque inconscientemente, al hacer esto se fue desarrollando un lenguaje orientado a la información que se puede extraer de los sistemas, sin que ello implicase al sistema propiamente dicho.

Una propiedad responsable del extraordinario comportamiento de los sistemas cuánticos es el “entanglement” o entrelazado. El entrelazado es un recurso que se pretende aprovechar en la computación cuántica, por ello, es necesario poder cuantificar y clasificar una propiedad tan importante como esta. En el presente trabajo se introduce un nuevo tipo de entropías informacionales cuánticas definidas en el espacio de Hilbert que hemos clasificado en términos de la marginalidad y la no marginalidad, las cuales siempre pueden detectar el entrelazado que está relacionado a la separabilidad y la no separabilidad de los sistemas. Dichas entropías fueron implementadas, caracterizadas y aplicadas en la descripción de sistemas y procesos químicos. También se muestra que estas entropías son mejores descriptores que las entropías de Shannon, Fisher y que los correspondientes descriptores de complejidad que se derivan de estas medidas clásicas.

A lo largo de la Tesis se muestra que existe un lenguaje conceptual químico que resulta más general en el sentido de la Teoría de Información Cuántica.

Los resultados de este trabajo se presentan en el siguiente orden:

1. Se introduce el lenguaje de la Teoría de Información Cuántica en la Química.
2. Se definen nuevos tipos de entropías cuánticas marginales y no marginales.
3. Se analiza el comportamiento general de las entropías marginales y no marginales, verificando las cotas a las que se encuentran sujetas, mediante un modelo sencillo de llenado electrónico con información total constante para medir la interacción (entrelazado) entre subsistemas. Estos resultados se muestran en el capítulo 6, pág. 55.
4. Se analizan algunos sistemas químicos, en los cuales se muestra que el entrelazado puede ser empleado para caracterizarlos, asimismo se muestra que algunos de los conceptos de reactividad empleados habitualmente están relacionados con ciertas magnitudes informacionales. Estos resultados se presentan en el capítulo 7, pág. 67.
5. Se estudian algunos procesos de disociación de sistemas diatómicos homo- y heteronucleares mediante medidas de información propuestas en este trabajo con lo que se muestra que los cambios detectados por las entropías marginales y no marginales están vinculados

con los cambios de los observables del sistema y con propiedades que no son observables directamente tales como regiones de acumulación o remoción de carga, ruptura de enlace, etc. Asimismo se verifica que es posible detectar el entrelazado en este tipo de procesos. Estos resultados se muestran en la sección 8.1, pág. 77.

6. Se analizan algunos procesos químicos más complejos tales como reacciones químicas (de las cuales sólo se presenta una de ellas) y se verifica que los puntos críticos de la estructura que se encuentran en las tendencias de las entropías están relacionados a los cambios físicos y químicos del sistema. También encontramos que la estructura de cualquiera de las entropías propuestas nos brinda más información que cualquiera de los descriptores comúnmente empleados en la Química Teórica, tales como: La energía total del sistema, energía de correlación, parámetros geométricos, frecuencias, momento dipolar, dureza, blandura, cargas, potencial electrostático molecular y laplaciano de la densidad.

Tal situación hace que las entropías marginales y no marginales sean excelentes candidatos para ser empleadas como descriptores de complejidad. Estos resultados se muestran en la sección 8.4, pág. 103.

7. Se comparan las tendencias obtenidas con las entropías de von Neumann propuestas (en espacio de Hilbert) con las entropías clásicas (Shannon y Fisher). De lo cual logramos establecer que la versatilidad de las entropías propuestas, así como su excelente concordancia con los puntos críticos que presentan las tendencias de algunos de los parámetros físicos y químicos aunado a su bajo costo computacional, son superiores a las medidas de información clásicas y pueden emplearse como mejores descriptores de complejidad. Estos resultados se muestran en la sección 8.5, pág. 131.

Capítulo 1

Introducción

¿Cuál es la importancia del concepto de medida de información en la Mecánica Cuántica? Para responder, es necesario tratar de establecer la importancia misma del concepto de información, el cual es un concepto general y perfectamente aplicable a cualquier caso. Por ejemplo; ¿Qué tienen en común los códigos utilizados para enviar mensajes desde un satélite de comunicaciones y las bases de una molécula de ADN? ¿Cómo se relaciona la segunda ley de la Termodinámica y la Comunicación, a tal grado que sea posible hablar de la entropía de una partitura musical, de una página, de una conversación? ¿Por qué los intrincados problemas de la probabilidad se relacionan en la forma en que nos expresamos oralmente o por escrito? La respuesta a todas es *información* y el hecho mismo de que un solo concepto pueda ligar ideas tan distintas revela su gran generalidad y poder.

Hasta los años cuarenta, no se había definido a la información como un término científico, y esta definición fue bastante novedosa, distinta a todos los significados comunes, y precisamente por haber sido descrito con una precisión suficiente para matemáticos e ingenieros en telecomunicaciones, se volvió más y más fascinante para la comunidad científica. La palabra comenzó a recuperar algunos de sus significados que habían caído en desuso. Surgió la idea de la información como agente activo, es decir algo que informa al mundo material de manera semejante a los mensajes de los genes, que dan instrucciones a la maquinaria celular para construir un organismo.

Así surgió la información como principio universal que opera en el mundo, que da forma, que especifica el carácter peculiar de las formas vivas, e incluso que ayuda a determinar, por medio de códigos especiales, las formas del pensamiento humano. De este modo, la información abarca los campos dispares de las computadoras, de las Tecnologías de Comunicaciones, la Física, la Biología, la Química, las Matemáticas, entre otras.

La información se convirtió en un concepto científico cuando se iniciaba la era de la comunicación electrónica. Los científicos, hicieron en gran medida lo que sus predecesores del siglo XIX hicieron con el concepto de energía. Lo convirtieron en teoría, le dieron leyes, lo festonaron de ecuaciones y como es costumbre lo despojaron de vaguedad y misterio. En su forma pura, la Teoría de la Información fue descubierta por el ingeniero Claude E. Shannon. Sus logros más notables se encontraron en las transmisiones de televisión a colores, el diseño de sistemas de radar para la alerta y en la recuperación de mensajes intactos llegados de un satélite de comunicaciones. Shannon, de los *Bell Telephone Laboratories*, la presentó al mundo en dos trabajos que publicó en el *Bell System Technical Journal* en julio y en octubre de 1948.

En esencia, los ensayos consisten en un conjunto de teoremas que se ocupan del problema del envío rápido, económico y eficiente de mensajes de un lugar a otro. Pero las implicaciones más vastas y fascinantes del trabajo de Shannon se centran en el hecho de haber conseguido exponer el concepto de información con tal lógica y precisión que puede colocarse dentro de un marco formal de ideas.

Al tratar la información en términos claramente definidos pero totalmente abstractos, Shannon pudo generalizarla y estableció leyes válidas no solo para unos cuantos tipos de información, sino para todos y en cualquier parte. Aunque sus ensayos pueden parecer bastante abstractos y técnicos en la primera lectura, proporcionan formas novedosas de analizar cualquier sistema o proceso en el que se intercambien mensajes.

Los ensayos de Shannon se ocupaban de temas que implicaban preocupaciones intelectuales comunes: orden, desorden, error y control del error, posibilidades y realización de posibilidades, la incertidumbre y sus límites. Los científicos todavía se preguntan por que los procesos de la naturaleza manifiestan tanto orden, cuando su estado más probable sería la incertidumbre y el caos, una rendición a las fuerzas del desorden universal que parecen tan abrumadoras y tan naturales. Esto se considera cómo una de las grandes paradojas de la ciencia relacionada a la cuestión filosófica del *¿por qué existe algo en lugar de la nada?* En sus ensayos, Shannon probó que contrariamente a lo que pudiera esperarse, *una parte* de un mensaje puede persistir en medio de la *nada*, de un desorden azaroso o de ruido.

Lo más asombroso, fue que la expresión de Shannon para la cantidad de información, primera medida precisa, científica, la primera definición satisfactoria del siglo XX, tenía la forma de una ecuación creada muchos años atrás, en el siglo XIX, para una ley física peculiar y muy elusiva: *la entropía*, generando así una equivalencia entre la entropía y la información, completamente aplicable a cualquier sistema o proceso.

Esta es una de las pocas teorías que tiene un nacimiento bien determinado en el tiempo, que tiene un cumpleaños y que tiene un padre. El padre se llamaba Claude E. Shannon y el artículo que da nacimiento a la teoría de la información fue publicado en 1948. Titulado "*A mathematical theory of communication*" [109] y apareció en la revista Bell System Technical Journal de la compañía Bell System. Es curioso que esta teoría tenga un nacimiento tan puntual, por que usualmente todas las creaciones importantes son creaciones colectivas. En 1998 se celebraron cincuenta años de la teoría y prácticamente en todo el mundo salieron números especiales en revistas especializadas, símbolos conmemorativos que demuestran todo lo que cambió en un periodo de tiempo tan corto. De todos los artículos publicados se recopilaron con motivo de los cincuenta años una serie de trabajos que la vinculaban con las Telecomunicaciones, y por supuesto, también con las Matemáticas, la Estadística, la Economía, la Lingüística, la Teoría Cuántica, la Astrofísica, la Física Atómica, la Genética, la Biología Molecular, las Redes Neuronales y un gran número de áreas más que en principio eran ajenas al modelo de Shannon. Dicho sea de paso, Claude E. Shannon murió a principios del 2001.

A mediados de la década de los 80, una parte de la comunidad científica pensó en combinar la Teoría de la Información con la Mecánica Cuántica lo cual propició la aparición de una nueva rama que se ha extendido para abarcar el hasta entonces intacto territorio de la transmisión y el procesamiento de los estados cuánticos, así como el estudio de la información cuántica y su relación con las formas tradicionales de información. Cabría preguntarse por qué esto no sucedió antes, puesto que hace mucho tiempo que los principios cuánticos se aceptaron como el fundamento de la Física Moderna. Hasta hace poco se pensaba en la información en términos

clásicos, y la Mecánica Cuántica jugaba sólo un papel secundario en el diseño de los equipos para procesarla y en el establecimiento de límites al ritmo con que se podía enviar por cierto tipo de canales.

A un nivel más fundamental, ha quedado patente que una Teoría de la Información basada en los principios de la Mecánica Cuántica, amplía y complementa la Teoría Clásica de la Información. Además de las generalizaciones cuánticas de nociones clásicas como las de fuentes, canales y códigos, esta nueva teoría incluye dos tipos complementarios de información cuantificable: la información clásica y el entrelazamiento cuántico. Desde hace una década se estableció que los esquemas clásicos de análisis destruyen el entrelazamiento [116], y como se mostrará en este trabajo, si se definen apropiadamente cierto tipo de operaciones denominadas transformaciones globales, es posible detectar el entrelazado. Así, una parte de la nueva Teoría de la Información Cuántica consiste en el estudio cualitativo y cuantitativo del entrelazado.

Finalmente el propósito de esta Tesis es presentar la idea de que se puede mejorar nuestro entendimiento de la Naturaleza al no solo analizarla exclusivamente en términos del comportamiento de la materia y la energía, aún a nivel de partículas elementales, sino que al estudiarla mediante las técnicas y métodos de la Física y Química modernas, se incorporen conceptos y herramientas que nos permitan investigar de manera global el comportamiento de los sistemas naturales con el fin de ahondar en nuestro entendimiento de los mismos al incorporar medidas de información que tomen en cuenta conceptos tales como el entrelazado, reconocido desde los primeros días de la Mecánica Cuántica, para el cual, sin embargo, no existen medidas dentro de las teorías clásicas.

A lo largo de la Tesis se presenta la descripción de sistemas y procesos químicos en términos de un concepto abstracto que es la información, las tendencias obtenidas se compararon con algunos descriptores comúnmente usados en la Física y la Química con la finalidad de enriquecer nuestra interpretación acerca del comportamiento de los sistemas. Para lograr esto, fue necesario considerar un esquema clásico y definir una probabilidad conjunta general que nos permitió definir dos esquemas de entropías informacionales: marginales y no marginales, los cuales cumplen con las cotas establecidas por la Teoría Clásica de la Información así como con los balances informacionales. El primero está relacionado a las interacciones clásicas de los sistemas mientras que con el segundo esquema puede detectar el comportamiento clásico y cuántico de la información en sistemas y procesos químicos a través de la violación de las cotas establecidas en la Teoría Clásica de la Información.

Asimismo se presenta la caracterización de un proceso químico mediante las tendencias de las entropías de Shannon, Fisher y con los descriptores de complejidad en espacio de posiciones y momentos, para ello se empleó software especializado [57, 94], el cual logramos aplicar exitosamente para la caracterización de sistemas de interés nanotecnológico [32–34].

La estructura general del presente trabajo es la siguiente:

Capítulo 1: se plantea la idea general de incorporar el concepto de información y las medidas de información a las teorías generales de la Química y de la Física.

Capítulos 2-4: se presentan los fundamentos de la Teoría Clásica de la Información.

Capítulo 5: se presentan los principios de la Teoría de Cuántica de la Información.

Capítulo 6: se presenta un modelo mediante el cual se caracterizaron las entropías informacionales marginales y no marginales propuestas en esta Tesis, lo cual constituye una de las partes medulares.

Capítulos 7 y 8: se presenta la caracterización de sistemas y procesos químicos mediante las entropías marginales, no marginales y los descriptores de complejidad.

Capítulos 9 y 10: se presentan las conclusiones y perspectivas.

Apéndices A y B: se presentan el análisis de población de Weinhold [103] empleado en este trabajo así como los fundamentos de las propiedades escalares empleadas y un esquema detallado de como calcular las entropías marginales y no marginales a partir de un cálculo de estructura electrónica.

Capítulo 2

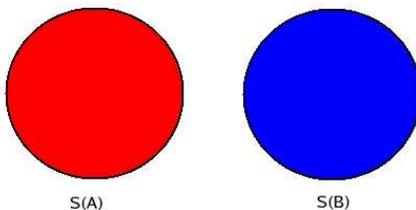
¿Qué es la información y cómo se mide?

La generalización de los conceptos

Las ciencias no intentan explicar, difícilmente interpretar, básicamente hacen modelos. Por un modelo se quiere decir una construcción matemática que en conjunto con ciertas interpretaciones verbales logre describir los fenómenos observados. La justificación de tal construcción matemática es única y lo que esperamos de ella es que funcione.

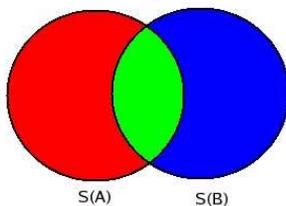
John von Neumann.

Una de las grandes dificultades de prácticamente cualquier modelo, es emplear conceptos lo suficientemente generales como para describir adecuadamente algún sistema complejo o no. Para ello, se puede definir un sistema abstracto que denominaremos A . Sin perder generalidad, podemos plantear que dicho sistema puede ser de tamaño finito o infinito, y dado que no hemos definido la naturaleza del mismo, lo podremos caracterizar por medio de su información la cual es la propiedad más general del sistema. Es bien sabido que todo sistema en la naturaleza interacciona con muchos otros sistemas que pueden ser iguales o diferentes. Entonces en base a lo anterior, podemos definir un sistema B que también puede ser finito o infinito y que la única propiedad intrínseca del mismo será su información y la forma más simple de representarlos es mediante el siguiente diagrama de Venn¹,

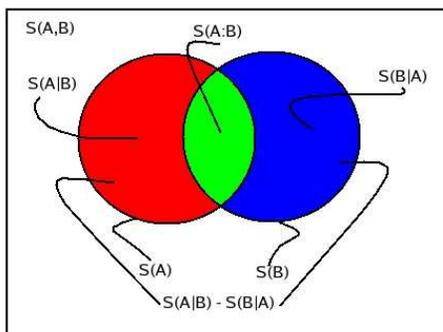


¹Es conveniente aclarar que los “diagramas de Venn” empleados en este trabajo son una representación esquemática que es comúnmente utilizada en el ámbito de la teoría de la información [2, 17, 68, 89, 90, 116] como una mnemotecnica para representar varias de las propiedades e interrelaciones de las entropías informacionales de una manera sencilla.

No obstante, este esquema es muy limitado como para describir el comportamiento de un sistema aislado. Por ello, debemos permitir que dichos sistemas puedan interactuar entre si, lo cual puede ser representado por:



Al interactuar, el comportamiento de la información del sistema A se verá afectado o modificado por el sistema B y viceversa. Tal interacción puede ser medida por $S(A | B)$ que se interpretará de la siguiente manera: *cómo se afecta al sistema A por hacerlo interactuar con el sistema B* , y también debemos de definir *cómo se afecta al sistema B por hacerlo interactuar con el sistema A* , dicho efecto puede ser medido por medio de $S(B | A)$. Es evidente, que al interactuar dichos sistemas, tendrán algún tipo de información que compartan o que los mantenga ligados, y para este propósito se define una medida de la información ligada como $S(A : B)$, así mismo se definirá la información no ligada como $S(A | B) - S(B | A)$ y la información total del sistema como $S(A, B)$, estas medidas de información pueden ser representadas de una manera muy simple con el siguiente diagrama de Venn



Con base en lo anterior podemos decir que este es un modelo general que puede ser aplicado para la descripción de cualquier sistema o proceso de la Naturaleza, no depende de ninguna teoría, técnica o metodología con la cual se pretenda determinar las propiedades inherentes del sistema, sino más bien de aquella teoría que consiga medir la información del sistema *per se*, tal teoría es la de información. Por tanto, el lenguaje que esta teoría proporciona es el más general posible para extraer la información de los sistemas y sus procesos. El propósito fundamental de esta Tesis, es mostrar que esta teoría contiene los conceptos generales de la Química Moderna y por tanto es posible representar dichos conceptos en un lenguaje más general.

Lo anterior nos lleva a replantearnos la idea de que la información se puede utilizar como una herramienta para comprender la misma Mecánica Cuántica a través de los conceptos de entrelazado e información, entre otros, por lo que cabe preguntarnos ¿Y si la información cuántica

no fuera una aplicación de la teoría, sino su fundamento? Entonces, si logramos comprender la naturaleza de la información e incorporarla en nuestro modelo del mundo físico, tendríamos que preguntarnos ¿Es posible reconstruir las leyes de la Física, el espacio, el tiempo, la materia en términos puramente informacionales?

Esta idea está actualmente en debate: afirmar que la Mecánica Cuántica no habla del objeto en sí mismo, sino de lo que se sabe sobre él. No es en las propiedades fisicoquímicas del protón, del electrón o de la molécula en donde radica la información de cada sistema sino en la información del vector de estado asociado en el espacio de Hilbert de cada sistema. Así, “electrón” o “átomo” son ante todo palabras y sus propiedades son ante todo características de un lenguaje específico que habla la Química o la Física, es decir, términos del lenguaje común que nos permiten hacer una abstracción de lo que constituyen estos objetos y, en el marco del vasto mundo epistemológico, será necesario redefinirlos en términos de la información.

Finalmente, podemos decir que la información es el mediador entre lo material y lo abstracto, entre lo real y su abstracción pura, entre el universo de infinitas posibilidades al que podemos acceder mediante la Mecánica Cuántica y el mundo perceptible a nuestros sentidos que medimos a través de los observables de la Física o la Química. Es esa extraña substancia comprensible que surge de los objetos tangibles, ya sea de un átomo, de una molécula de ADN, de un libro o de un piano, y que, después de una serie de transformaciones complejas en las que intervienen los sentidos, termina alojándose en nuestro cerebro consciente.

En el siguiente capítulo se hace una breve discusión acerca de una nueva rama de la Física Moderna llamada Complejidad, así como su relación con la Teoría de Información Clásica.

Capítulo 3

Complejidad y Teoría de Información

Hay una teoría que afirma que si alguien descubriera lo que es exactamente el Universo y el por qué de su existencia, desaparecería al instante y sería sustituido por algo aún más extraño, complejo e inexplicable... Hay otra teoría que afirma que eso ya ha ocurrido.

D. Adams

Con la aplicación del paradigma newtoniano, el análisis del mundo se reduce a un modelo de mecánica simple, aunque la complejidad del mismo sea evidente. Por otro lado, el éxito del paradigma newtoniano es innegable, y prueba de ello es el desarrollo de la ciencia y tecnología modernas. Que tenga límites no implica que no funcione en un determinado ámbito sino que son precisamente estos límites los que dan lugar al concepto de “complejidad”.

La ciencia trabaja combinando la observación de la realidad con algún tipo de actividad inductiva para obtener generalizaciones a partir de esta observación. En definitiva, con el método científico se relaciona el mundo real (o sistema natural) con el mundo de las ideas (sistema formal), codificando el sistema natural en otro sistema, desarrollado por el investigador, que es el sistema formal. Se trabaja con este sistema formal hasta conseguir que represente adecuadamente el sistema natural. Entonces se decodifica el sistema formal para verificar si representa o no adecuadamente el fenómeno natural observado. Si este esquema funciona, se obtiene un modelo del mundo real. El problema con el que nos encontramos es que, debido a que el mundo es complejo, el sistema formal no va a poder capturarlo por completo, y por eso no puede representarlo adecuadamente. Durante mucho tiempo, el sistema formal adecuado fue el proporcionado por el paradigma newtoniano, y esto fue tanto así que el mismo paradigma reemplazó al mundo real: el sistema formal tomó el lugar del sistema natural. Pero conforme los problemas fueron examinados con mayor profundidad, hubo aspectos que el paradigma newtoniano no explicaba adecuadamente, y que por tanto necesitaban una explicación diferente lo cual se pretende lograr con el concepto de complejidad. Sin embargo, como señalan Colander, Holt y Rosser [26], no hay un acuerdo en la definición del vocablo complejidad. De hecho, cada una de las definiciones proporcionadas se centra en una característica diferente de la complejidad, quedando claro que se trata de un concepto multidisciplinario. Day [27] trabaja con una definición matemática de complejidad: un sistema es complejo si endógenamente no tiende a un punto fijo, ni a un ciclo límite, ni a un comportamiento explosivo. Pryor [99] y Stodder [113] trabajan con una visión estructural de la complejidad, incidiendo en la cantidad de estructuras implicadas, y en las complicadas interrelaciones entre ellas. Otros autores (Leijonhufvud [61], Stodder [113], Albin

y Foley [3]) trabajan con una definición computacional: una situación es compleja cuando existe una gran dificultad para calcular las soluciones a los problemas de optimización. Horgan [45] también proporciona otras definiciones de complejidad: complejidad como entropía, desorden de un sistema; complejidad como la capacidad de un sistema para informar a un observador; complejidad como la incertidumbre acerca del estado de un sistema, el grado de detalle que muestra a escalas cada vez menores; complejidad como el tiempo requerido para que un ordenador describa un sistema, o la cantidad de memoria requerida para esa descripción; complejidad como el grado en que una parte del sistema proporciona información acerca de otras partes, etc.

Con lo anterior, se puede establecer que: *La complejidad de los sistemas naturales, se manifiesta en la incapacidad de que cualquier tipo de sistema formal pueda capturar adecuadamente todas sus propiedades aunque se disponga de una información completa de sus componentes y sus interrelaciones.*

De cualquier modo, la complejidad está unida a conceptos como incertidumbre, contradicción y totalidad [72]. Por lo anterior, queda preguntarnos cuales son los motivos que conducen a esta incapacidad de los sistemas formales para capturar las propiedades de los sistemas naturales, cuando éstos son complejos. Existen distintos conceptos relacionados con la complejidad de un sistema:

1. *El tamaño del sistema*: indica la dificultad que conlleva el manejo del sistema. Pero el tamaño no conduce indefectiblemente a la complejidad del sistema, sino que es necesaria una suposición adicional: la existencia de un gran número de interrelaciones entre los elementos del sistema.
2. *El desconocimiento*: es una causa de la ignorancia, pero puede no ser la única.
3. *La cantidad de información*: está relacionada con su complejidad de manera que si un sistema tiene poca información, será poco complejo pero no todo sistema con mucha información será necesariamente complejo ya que puede haber mucha información, pero pocas interrelaciones entre los elementos del sistema.
4. *La variedad*: es necesaria para la complejidad, pero no es una condición suficiente.
5. *El orden y el desorden*: el sistema complejo se mueve entre el orden y el desorden. Algo completamente desordenado no es complejo, ni algo totalmente ordenado.

Después de todo lo dicho, cabría preguntarse ¿qué es entonces un sistema complejo? Al igual que ocurre con el vocablo complejidad, no hay una definición única. De hecho, existe un número especial de la revista Science (Vol. 284, No. 5411, 1999) dedicado a esta cuestión. En este número se encuentran, entre otras, las siguientes definiciones:

1. Sistemas altamente estructurados, pero cuya estructura cambia constantemente.
2. Sistemas cuya evolución es muy sensible a las condiciones iniciales o a pequeñas perturbaciones, con un elevado número de elementos interactuantes o con múltiples trayectorias por las que evolucionar.
3. Sistemas difíciles de comprender y contrastar mediante diseños o funciones.

4. Sistemas en los que existen numerosas interacciones entre diferentes componentes.
5. Sistemas que evolucionan constantemente con la posibilidad de existencia de bifurcaciones.

Es evidente que con todo lo anterior es una tarea colosal definir la complejidad dentro de un contexto general, por ello, en el presente trabajo, consideraremos que la complejidad de un sistema puede ser determinada mediante una medida de información, con el fin de describir la función y estructura de un sistema determinado que involucra interacciones entre sus diferentes componentes.

Hay dos grandes problemas de la complejidad: uno es ¿cómo se adapta un sistema a una perturbación? y otro ¿cómo hemos pasado de las partículas elementales a el ser humano capaz de escribir El Quijote? Entonces se puede preguntar ¿qué ha hecho que el estudio de la materia se haya complicado tanto? ¿sería posible lograr una mejor comprensión de la Naturaleza empleando la información como un concepto fundamental?

Así, muchas de las ideas y conceptos de la ciencia de los sistemas complejos suponen un auténtico reto para la integración de diversas disciplinas. Entre ellas podríamos citar a la Dinámica no lineal y la Teoría del Caos, la Física Estadística, la Teoría de la Información y de los sistemas, diversas áreas y métodos de la ingeniería, la ciencia de las redes complejas y la Biología de sistemas. Este listado naturalmente no es completo, pero da una noción del reto que hay detrás de la idea de la complejidad, la cual pretende integrar diferentes disciplinas del conocimiento [4, 5, 31, 41, 120, 123].

En la Física, la Complejidad en conjunto con la Teoría de la Información Clásica (la cual se abordará en el siguiente capítulo) se han aplicado fundamentalmente para la descripción de algunos sistemas atómicos, para los cuales se han definido algunos descriptores de complejidad en términos de las entropías de Shannon y Fisher en el espacio de posiciones y momentos [6, 63, 75, 91, 92, 108, 124], cuyas definiciones se muestran a continuación:

Las entropías de Shannon en espacio de posiciones y momentos,

$$S_{\vec{r}} = - \int \rho(\vec{r}) \ln \rho(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (3.1)$$

$$S_{\vec{p}} = - \int \rho(\vec{p}) \ln \rho(\vec{p}) d\vec{p}, \quad (3.2)$$

en donde $\rho(\vec{r})$ es la densidad electrónica en espacio de posiciones y $\rho(\vec{p})$ es la densidad en espacio de momentos.

La entropía de Shannon total, se define como [16]:

$$S_{\vec{r}\vec{p}} = S_{\vec{r}} + S_{\vec{p}}. \quad (3.3)$$

Las entropías de Fisher,

$$I_{\vec{r}} = \int \frac{|\nabla \rho(\vec{r})|^2}{\rho(\vec{r})} d\vec{r}, \quad (3.4)$$

$$I_{\vec{p}} = \int \frac{|\nabla \rho(\vec{p})|^2}{\rho(\vec{p})} d\vec{p}, \quad (3.5)$$

la entropía de Fisher total,

$$I_{\vec{r}\vec{p}} = I_{\vec{r}} \cdot I_{\vec{p}}. \quad (3.6)$$

Mientras que los descriptores de complejidad en espacio de posiciones y momentos, están definidos como [7, 8, 49, 63, 71]:

1. El desequilibrio¹,

$$D_{\vec{r}} = \int \rho(\vec{r})^2 d\vec{r}, \quad (3.7)$$

$$D_{\vec{p}} = \int \rho(\vec{p})^2 d\vec{p}, \quad (3.8)$$

$$D_{\vec{r}\vec{p}} = D_{\vec{r}} \cdot D_{\vec{p}}. \quad (3.9)$$

2. La entropía de Shannon exponencial,

$$J_{\vec{r}} = \frac{1}{2\pi e} \exp \left\{ \frac{2}{3} S_{\vec{r}} \right\}, \quad (3.10)$$

$$J_{\vec{p}} = \frac{1}{2\pi e} \exp \left\{ \frac{2}{3} S_{\vec{p}} \right\}, \quad (3.11)$$

$$J_{\vec{r}\vec{p}} = J_{\vec{r}} \cdot J_{\vec{p}}. \quad (3.12)$$

3. La entropía simple de Shannon exponencial,

$$E_{\vec{r}} = \exp \{ S_{\vec{r}} \}, \quad (3.13)$$

$$E_{\vec{p}} = \exp \{ S_{\vec{p}} \}. \quad (3.14)$$

4. La medida de complejidad,

$$C_{\vec{r}} = J_{\vec{r}} \cdot D_{\vec{r}}, \quad (3.15)$$

$$C_{\vec{p}} = J_{\vec{p}} \cdot D_{\vec{p}}, \quad (3.16)$$

$$C_{\vec{r}\vec{p}} = C_{\vec{r}} \cdot C_{\vec{p}}. \quad (3.17)$$

5. La medida simple de complejidad,

$$F_{\vec{r}} = E_{\vec{r}} \cdot D_{\vec{r}}, \quad (3.18)$$

$$F_{\vec{p}} = E_{\vec{p}} \cdot D_{\vec{p}}. \quad (3.19)$$

6. El producto Fisher-Shannon,

$$P_{\vec{r}} = J_{\vec{r}} \cdot I_{\vec{r}}, \quad (3.20)$$

$$P_{\vec{p}} = J_{\vec{p}} \cdot I_{\vec{p}}. \quad (3.21)$$

Finalmente, si bien es cierto que la parte conceptual de la complejidad puede ser extremadamente interesante de aplicar debido a que los descriptores de la misma nos permitirían caracterizar de una manera general los sistemas, no perdamos de vista que tales descriptores, solo nos brindan una descripción limitada y reduccionista de los sistemas debido a que para el uso de los mismos tenemos que aplicar los siguientes pasos de reducción:

¹Véase la referencia [63] para la justificación de esta medida.

1. Obtener la función de onda.
2. Efectuar una reducción de la función de onda (pasar del espacio de Hilbert al espacio real).
3. Particionar el sistema en el espacio real.
4. Integrar nuevamente en el espacio real.

Esto implica que hay una pérdida de información, y consecuentemente la descripción del sistema será limitada.

Así en el presente trabajo, aplicamos los conceptos de complejidad anteriormente mostrados para realizar la caracterización de algunos procesos químicos [35], y mostramos que las entropías marginales y no marginales describen mejor los procesos que los descriptores de complejidad.

En el siguiente capítulo se presentan las definiciones de las diferentes entropías informacionales de la Teoría Clásica de la Información así como las relaciones entre los diferentes tipos de entropías informacionales, las cuales para propósitos de esta Tesis fueron tomadas como referencia para un nuevo tipo de entropías de von Neumann que clasificamos en términos de la marginalidad y la no marginalidad.

Capítulo 4

Teoría Clásica de la Información

¿Por qué no la llamas entropía? (...) nadie sabe realmente lo que es la entropía, así que ante cualquier debate estarás siempre en una posición ventajosa.

John von Neumann a Claude E. Shannon (1948).

¿Cómo medir la información de un sistema? Este planteamiento parece en principio poco factible y puede resultar extremadamente abstracto, sin embargo la clave consiste en tratar de medir la información independientemente de la fuente de donde provenga. Por ejemplo, no es una medida de la información el número de páginas de un libro. Por que puede ser un libro muy grueso y muy pesado, pero que no aporte nada. Definitivamente tenemos noción de que la medida de información misma, no está necesariamente ligada al volumen de su soporte físico. O podemos tener un archivo enorme, pero que se repite muchas veces. Eso no es información. El problema con el que uno se enfrenta es con el de la subjetividad de la información. Es decir, un mismo mensaje es mucho más informativo para una determinada persona que para otra. ¿Por qué puede pasar que un mensaje sea mucho más informativo que otro? simple y sencillamente, por que nos interesa distinguir las cosas, también puede ser por que ya lo sabíamos, y este es un concepto bastante claro e interesante.

La información y la incertidumbre, son como dos caras de una misma moneda. La incertidumbre es “*a priori*”, cuando todavía no conocemos el mensaje, y la información es “*a posteriori*”, cuando ya nos dieron un mensaje. Entonces, cuando un problema es extremadamente complejo, lo que es necesario para el desarrollo de la ciencia es plantear un modelo que sea lo suficientemente expresivo pero que trate de no incluir todas las variables juntas y al mismo tiempo, por que así no se llega a nada.

Un ejemplo sencillo es el resultado de un experimento aleatorio. Si tenemos una urna con diez pelotas blancas y una roja, y damos la información de qué resultado nos da un experimento aleatorio al sacar una de ellas, cuando decimos que salió roja o cuando salió blanca, ¿recibimos la misma cantidad de información o no? ¿la cantidad de información recibida en uno u otro caso es la misma? ¿cuando recibimos más información? Se recibe más información, cuando la pelotita que salió es roja en vez de que hubiese salido blanca ya que entonces no sabríamos cuál de las diez es. Entonces la cantidad de información que se recibe está vinculada con un solo aspecto: la *probabilidad*.

Así, la entropía, es una medida de la cantidad de información que está directamente relacionada con la probabilidad. A continuación se presentan las definiciones y propiedades elementales de las entropías informacionales [2, 17, 42, 54, 59, 68, 95, 110].

Definición 4.1. *Entropía de Shannon.*

La entropía de Shannon $H(X)$ de una variable aleatoria X definida en un espacio de probabilidad finito es

$$H(X) \equiv - \sum_{x \in \Omega} p(x) \ln p(x),$$

en donde $p(x) \equiv P[X = x]$ es la distribución de probabilidad de X que pertenece al espacio muestral Ω y que cumple que $0 \leq p(x) \leq 1$ y $\sum_{x \in \Omega} p(x) = 1$ y por convención $0 \ln 0 = 0$, lo cual se justifica por que la función

$$f(x) = \begin{cases} x \ln x, & x > 0 \\ 0, & x = 0, \end{cases}$$

es continua en cero, pues $x \ln x \rightarrow 0$ cuando $x \rightarrow 0$. Obsérvese que la entropía de Shannon es una cantidad “no negativa”.

Definición 4.2. *Entropía relativa de Shannon.*

Sean $p(x)$ y $q(x)$ dos distribuciones de probabilidad. La entropía relativa de $p(x)$ respecto a $q(x)$ es

$$H(p(x) \parallel q(x)) \equiv \sum_x p(x) \ln \frac{p(x)}{q(x)}.$$

Definición 4.3. *Entropía conjunta.*

Sean X, Y variables aleatorias discretas. La entropía conjunta de X, Y se define por

$$H(X, Y) = - \sum_{x, y} p(x, y) \ln p(x, y).$$

Definición 4.4. *Entropía condicional.*

Sean X, Y variables aleatorias. La entropía de X condicionada a que conocemos Y se define como

$$H(X | Y) = H(X, Y) - H(Y).$$

Definición 4.5. *Información común.*

Sean X, Y variables aleatorias. La información común o compartida entre X y Y se define como

$$H(X : Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y)$$

o bien como

$$H(X : Y) = H(X) - H(X | Y).$$

Algunas de las propiedades de estas entropías son:

Propiedad 4.1. *La información común y la entropía conjunta son invariantes operacionalmente:*

$$H(X : Y) \equiv H(Y : X)$$

y

$$H(X, Y) \equiv H(Y, X).$$

Propiedad 4.2. La entropía condicional es positiva, $H(X | Y) \geq 0$, consecuentemente

$$H(X : Y) \leq H(Y),$$

que será una igualdad si y sólo si Y es función de X , $Y = f(X)$.

Propiedad 4.3. Sub-aditividad.

$$H(X, Y) \leq H(X) + H(Y),$$

que será una igualdad si y sólo si X y Y son variables aleatorias “independientes”.

Propiedad 4.4. $H(X | Y) \leq H(X)$.

Consecuentemente $H(X : Y) \geq 0$, la igualdad se cumplirá, si y sólo si X y Y son variables aleatorias independientes.

Propiedad 4.5. Sub-aditividad fuerte.

$$H(X, Y, Z) + H(Y) \leq H(X, Y) + H(Y, Z).$$

Propiedad 4.6. El condicionamiento reduce la entropía.

$$H(X | Y, Z) \leq H(X | Y).$$

Todas las definiciones anteriores se encuentran vinculadas entre sí como se muestra en la Figura (4.1).

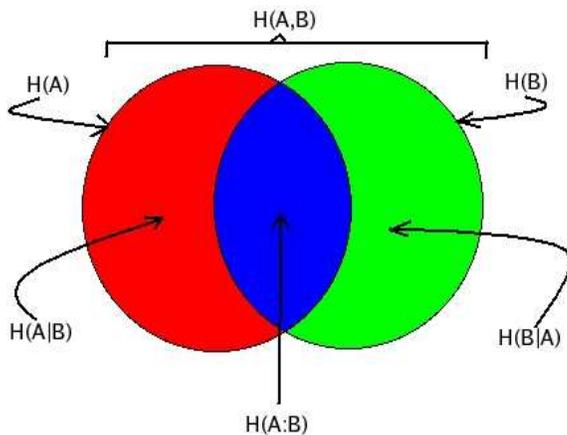


Figura 4.1: Relación entre las diferentes entropías informacionales clásicas. Entropía conjunta, $H(A, B)$ (Información total del sistema). Información mutua, $H(A : B)$ (Información que los subsistemas comparten). Entropías de los subsistemas $H(A)$ y $H(B)$. Entropías condicionales, $H(A | B)$ y $H(B | A)$.

Cuando se aplican los métodos de análisis de la Mecánica Cuántica al estudio de la información, se obtienen resultados no conciliables con las ideas de la Física Clásica, esto ha favorecido el nacimiento de un nuevo paradigma de descripción formal: la Teoría Cuántica de la Información. Algunos puntos en los que difiere esta nueva disciplina de su predecesora, provienen de la Física Cuántica, sin igual en la Física Newtoniana. A modo de ejemplo, podemos citar los resultados experimentales derivados del carácter “no local” de la Naturaleza [9–11]. Por ello una de las primeras recetas que hay que seguir a la hora de analizar las nuevas propuestas de la Teoría de la Información Cuántica, consiste en abstenerse de buscar explicaciones clásicas. Se debe de realizar un esfuerzo intelectual y acostumbrarse a pensar en términos de un solo concepto abstracto que es la información. Tal vez con el paso del tiempo hablar y caracterizar un sistema en base a su información sea enteramente natural y aceptado como ahora lo son varias propiedades o explicaciones del comportamiento de los sistemas, las cuales en su momento fueron derivadas del formalismo de la Mecánica Cuántica.

Schrödinger usó el término *Verschränkung* para designar la superposición lineal de estados en sistemas de varias partículas [107]. En la actualidad se utiliza la palabra inglesa *entanglement*, que puede traducirse al español como entrelazado. Con estos términos se denota la propiedad de aquellos estados de un sistema compuesto que contienen correlaciones cuánticas, que clásicamente no son permitidas. Este entrelazado cuántico es responsable de algunas de las propiedades más llamativas de la Mecánica Cuántica: la Teleportación Cuántica, la Criptografía cuántica, la Superaditividad en la Comunicación, la Computación Cuántica, etc.

El fenómeno del entrelazado ha suscitado una gran interés por su importancia decisiva en la nueva ciencia de la información cuántica, por ello, resulta interesante establecer una conexión, iniciando una investigación sobre este tema, sobre la conexión lógica entre las medidas de información clásicas y la Teoría de Información Cuántica; es decir para estudiar la correlación clásica y el entrelazado. La importancia del tema radica en que la condición de entrelazado está presente en todos los sistemas químicos.

Es evidente que no tenemos acceso al mundo mas que a través de la información que extraemos de él a través de nuestras sensaciones, las cuales son limitadas: de Demócrito a Kant, los filósofos nos han alertado de este velo inevitable que nos separa de la realidad. Pero al prolongar el pensamiento de los grandes fundadores de la Física Moderna como N. Bohr, E. Schrödinger o W. Pauli, esta idea se revela de hecho como extraordinariamente adecuada para interpretar la Mecánica Cuántica. Y esto debido a que la información no se comporta en absoluto como la materia ya que a diferencia de ésta, no tiene posición espacial ni temporal y se le puede duplicar, partir, resumir, suprimir, . . . basta entonces con retomar uno a uno todos los fenómenos cuánticos que, atribuidos a la materia, parecían tan extraños para darse cuenta que son naturales cuando se les atribuye a la información.

En el siguiente capítulo se dan algunos de los fundamentos de la teoría de la información cuántica, así como algunos de los aspectos generales de este nuevo modelo para el cual se da una breve discusión sobre los teoremas EPR y de Bell, los estados puros, no puros y finalmente se dan las definiciones de las entropías informacionales de von Neumann marginales que hemos propuesto y clasificado en términos de la no marginalidad así como las propiedades que este tipo de entropías tienen.

Capítulo 5

Teoría Cuántica de la Información

Yo no diría que el entrelazamiento es sólo otro de los rasgos característicos de la Mecánica Cuántica sino que es aquel que nos obliga al abandono completo del pensamiento clásico.

E. Schrödinger (1935).

En un intento de mostrar la naturaleza paradójica de las funciones de onda entrelazadas. Schrödinger llevo la descripción cuántica a sus extremos, aplicándola a un sistema macroscópico, para el que, según él, se hace evidentemente inaceptable y paradójica. Schrödinger estableció que en los estados entrelazados es donde se encuentra la separación definitiva entre el mundo clásico y el cuántico, y que es en ellos en donde se generan los problemas conceptuales más profundos de la Física Moderna, por lo que debe de estudiárseles exhaustivamente para desenmarañar sus misterios.

El sistema analizado por Schrödinger consta de un núcleo radiactivo y un gato, encerrados dentro de una caja. La caja contiene un detector que dispara un mecanismo capaz de envenenar al gato en caso de que el núcleo decaiga. Tanto el núcleo como el gato pueden encontrarse en dos estados, que son: *a)* para el núcleo, ν_0 si no ha decaído y ν_1 si ya lo ha hecho; *b)* para el gato, γ_V si está vivo y γ_M si está muerto. La función de onda que describe el sistema aislado (si no tomamos en cuenta la normalización) es

$$\Psi = \nu_0\gamma_V + \nu_1\gamma_M. \quad (5.1)$$

Esta ecuación representa el estado entrelazado del gato y el núcleo atómico. Si en vez del gato se estuviera hablando de un sistema atómico (que se excita o no debido al decaimiento del núcleo, por ejemplo) la descripción sería enteramente usual y se aceptaría como correcta. Pero la intervención del gato que se encuentra en una superposición de gato vivo y gato muerto, revela la naturaleza paradójica de la descripción suministrada por un estado entrelazado. La paradoja se agudiza al considerar una “medición”, es decir, al observar el interior de la caja, pues sabemos por experiencia que debemos encontrar un gato vivo o muerto, pero nunca la superposición (5.1). Esto obliga a introducir el postulado de *colapso* o *reducción de la función de onda*, según el cual Ψ se reduce por el acto de observación de $\nu_0\gamma_V$ si el núcleo no ha decaído y el gato permanece vivo, o de $\nu_1\gamma_M$ si el núcleo decayó y encontramos al gato muerto. Generar de una manera natural este colapso ha sido tema central de la Teoría Cuántica de la Medición. Sin embargo desde la perspectiva en que nos hemos colocado, no hay colapso físico alguno; lo que ocurre simplemente es que la observación nos proporciona una nueva información, la

cual usamos para construir una *nueva* descripción, consistente con ella: el gato está vivo o muerto. Esto sucede con cualquier descripción estadística como consecuencia de utilizar la nueva información. En otras palabras, una descripción estadística no es nunca completa ni agota las posibilidades, de tal manera que el incremento de información nos permite mejorar la descripción.

5.1. Los teoremas de Einstein, Podolsky, Rosen (EPR) y de Bell

Consideremos una partícula de espín cero, en reposo, que espontáneamente se desintegra en dos partículas de espín $1/2$, las cuales son emitidas en direcciones opuestas sobre el eje O_x . La función de onda que describe el estado del espín del sistema está dada por

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)],$$

es decir, es un escalar de espín 0. Como sabemos, la función de onda no tiene ninguna dirección privilegiada, es totalmente isotrópica. Consideremos por el momento este sistema desde la perspectiva adoptada en el trabajo de A. Einstein, B. Podolsky y N. Rosen [30] (en adelante nos referiremos a este trabajo como EPR). Para ello, esperamos que las partículas que estén muy alejadas, de tal manera que no pueda darse ninguna interacción entre ellas; medimos entonces el espín de la partícula 2, sobre la dirección (arbitraria) O_z ; supongamos que el resultado es $+1/2$. Esto nos dice que si se midiera la proyección sobre el eje O_z del espín de la partícula 1 (sobre la cuál no hemos hecho ninguna medición) resultaría $-1/2$. Para EPR, este resultado, obtenido con probabilidad 1 y sin perturbar la partícula 1, significa que esta partícula *posee* (en algún sentido apropiado) espín $-1/2$ sobre el eje O_z . Es importante observar que el estado de la partícula 1, pese a que esta partícula no es tocada, cambia con la supuesta medición, pasando de la indefinición total que le asigna la función de onda a la definición precisa que significa tener el valor $-1/2$. Esto es enteramente equivalente a lo sucedido con el gato de Schrödinger pero ahora referido a sistemas, los dos, microscópicos.

Ahora decidimos que en vez de medir el espín de 2 sobre O_z , lo mediremos sobre el eje O_x . Supongamos que obtenemos un valor de $+1/2$. Esto significa que ahora le asignamos espín $-1/2$ sobre el eje O_x a la partícula 1, y esta asignación es tan legítima como la asignación anterior, por lo que decimos que la partícula 1 *tiene* proyección de espín, sobre el eje O_x de valor $-1/2$. Este procedimiento imaginario, potencialmente posible, nos lleva a concluir que el espín de la partícula 1 *tiene* un valor bien definido simultáneamente sobre las direcciones O_x y O_z . Pero en la Mecánica Cuántica, estos valores no pueden coexistir, pues los operadores σ_x y σ_z no conmutan y no tienen estados propios simultáneos. La conclusión del trabajo EPR es que no todas las propiedades objetivas de los sistemas cuánticos, están contenidas en la descripción que ofrece la función de onda, por lo que debe de concluirse que la teoría es incompleta. La afirmación de la incompletez de la Mecánica Cuántica constituye el teorema EPR. En la actualidad, el mismo experimento pensado y un análisis similar, puede emplearse para demostrar, no la incompletez de la Mecánica Cuántica, sino que las variables dinámicas no poseen valores preexistentes a la medición.

Treinta años después de la paradoja EPR, el físico inglés J. Bell utilizó el mismo experimento pensado para establecer su teorema, que se ha convertido en uno de los puntos de interés de los trabajos teóricos y experimentales sobre los fundamentos de la Teoría Cuántica en las últimas décadas. El teorema de Bell [13] es un intento de establecer un resultado que permita poner a prueba la hipótesis de la posibilidad de completar la descripción cuántica, introduciendo variables ocultas. La introducción de tales variables tiene como objetivo central recuperar el determinismo en la descripción completa. Por ejemplo, si al medir el momento de una partícula en dos experimentos equivalentes se obtiene p_1 en un caso y p_2 en el otro, se supone que ello

se debe a las variables que determinan el valor preciso de p en el experimento, ocultas para la presente Teoría Cuántica, tuvieron un valor de λ_1 en el primer caso y λ_2 en el segundo. Si tuviéramos acceso a las variables λ (con lo que dejarían de ser ocultas y pertenecerían a la Mecánica Cuántica actual), estaríamos en condiciones de predecir precisamente el valor de p en cada caso. En el curso de los años se establecieron varios teoremas tendientes a mostrar que la Mecánica Cuántica no puede completarse apropiadamente sin que se alteren sus resultados (los cuales se consideran suficientemente probados como para que pueda dudarse de ellos). Los más conocidos de estos teoremas –el de von Neumann (1932) [121], el de Gleason (1957) [39] y el de Kochen y Specker (1967) [56]– fueron superados en popularidad (debido a su eficiencia) por el teorema de Bell (1964), que establece la incompatibilidad entre la Mecánica Cuántica y la clase de teorías de variables ocultas locales.

Los postulados con los que se establecen las desigualdades de Bell [13, 93, 97, 98] son pocos y muy generales:

Postulado 5.1. *Postulado del realismo determinista (existencia de las variables ocultas).*

El resultado de una medición está determinado causalmente por un conjunto de variables aleatorias complementarias tales que al considerarlas con la función de onda, se podrá determinar de manera completa el estado de cualquier ente cuántico.

Nótese la generalidad de la hipótesis. No se especifican si las variables ocultas tienen o no sentido ontológico, es decir, si los valores de las variables dinámicas son o no preexistentes a la medición. Tampoco si tales variables son o no contextuales, locales o no locales, etc.

Postulado 5.2. *Postulado de la localidad (o de la separabilidad).*

Una vez preparado el sistema, el valor de las variables ocultas que afectan a un ente dado no es alterado por eventos que suceden en regiones suficientemente separadas (espacial o temporalmente), del ente en cuestión.

Dos eventos se consideran aquí lo suficientemente distantes o separados si no existe interacción o influencia física conocida que pueda conectarlos causalmente. Las desigualdades por obtener se aplicarán a sistemas cuánticos descritos por estados entrelazados, por lo que la interacción entre las partes se dio “en el pasado”. Estos dos postulados en conjunto implican que el valor medio de un observable está en cada caso predeterminado, y es enteramente local. Pero este es un argumento contrafactual (no verificable experimentalmente), de peso muy discutible.

Postulado 5.3. *Postulado de equivalencia de ambas descripciones.*

El valor calculado de las correlaciones entre variables dinámicas que pertenecen a dos partículas y el promedio del correspondiente valor medio calculado en cada una de las mediciones son iguales.

La teoría *realista local* satisface estos tres postulados, y con ello sería posible demostrar que los tres postulados anteriores son suficientes para establecer condiciones experimentalmente verificables (en teoría) que deben de satisfacer las funciones de correlación de una teoría realista local. Sin embargo en última instancia no se requiere probar las desigualdades de Bell para determinar si la Mecánica Cuántica satisface o no los principios del realismo local. Para ello basta, simplemente con verificar si las predicciones no locales se cumplen o no en el laboratorio, aunque realizar esto resulta muy complicado. La discusión al respecto ha mostrado con claridad

que es la no localidad atribuida a los estados entrelazados la que conduce a las violaciones de las desigualdades de Bell.

Si se acepta que la Mecánica Cuántica viola el teorema de Bell entonces debe de concluirse que la Mecánica Cuántica es inconsistente con la interpretación realista local, lo que tiene importantes consecuencias. Por ejemplo debe de concluirse que los sistemas cuánticos no poseen propiedades objetivas, previas a la medición, cuyos valores son simplemente revelados por el experimento.

Se ha realizado un gran número de experimentos para verificar si las desigualdades de Bell, se cumplen o se violan [9, 114, 115]. Suele considerarse que los experimentos realizados, han mostrado que las desigualdades de Bell, se violan, y por lo tanto el realismo local ha sido refutado en los experimentos. Obsérvese atentamente la naturaleza novedosa de la conclusión: implicaría un dilema de índole metafísica *¿Vale o no vale el realismo local en la naturaleza?*, el cual se resuelve por vía empírica, asunto que ya ha sido clasificado de metafísica experimental. De alguna forma, el único antecedente en la Física de esta novedosa situación fue en su momento el teorema EPR [30].

La razón de la popularidad de las desigualdades de Bell radica en el hecho de que se les puede llevar al terreno experimental, lo que abre la vía para que las largas discusiones sobre los problemas fundamentales de la Mecánica Cuántica (determinismo *vs.* indeterminismo, localidad *vs.* holismo, objetividad *vs.* subjetividad, etc.) dejen el terreno de lo especulativo para pasar a lo experimentalmente verificable (o refutable según se prefiera). Sin embargo, el hecho es que en este terreno persisten las discusiones y desacuerdos, y hay razones poderosas para ello. Aceptando la validez de la descripción cuántica, el esquema planteado estriba en rechazar de plano la existencia de variables ocultas, y regresar con ello al indeterminismo, o considerar que la teoría final será determinista, pero no necesariamente local.

5.2. Estados puros y no puros

La descripción de un sistema físico en términos de una matriz de densidad es la descripción cuántica más general de que se dispone; este formalismo incluye como caso particular la descripción de estados puros. En términos generales para un sistema compuesto por dos subsistemas se dice que es un estado puro si puede escribirse de la siguiente forma

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle^{(1)} \otimes |\phi\rangle^{(2)}$$

y que satisfaga todas las desigualdades de Bell y admita una descripción en términos de variables ocultas locales. Por el contrario, los estados entrelazados no son factorizables, y todos ellos violan alguna desigualdad de Bell. Más adelante indicaremos como la entropía proporciona otra distinción fácil de comprobar.

Una clasificación más fina puede conseguirse analizando la descomposición de Schmidt. Es evidente que todo estado total puro puede escribirse como

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \alpha_{i,j} |u_i\rangle^{(1)} \otimes |w_j\rangle^{(2)}$$

donde, $\{|u_i\rangle^{(1)}\}$ y $\{|w_j\rangle^{(2)}\}$ son las bases de cada una de las partes del sistema total. Pues bien, para cada estado total puro existe al menos un par de bases ortogonales $\{|a_i\rangle^{(1)}\}$ y $\{|b_j\rangle^{(2)}\}$ tales que

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^k z_i |a_i\rangle \otimes |b_i\rangle,$$

donde k se llama el rango de Schmidt del estado puro $|\Psi\rangle$ y es siempre menor o igual que la menor de las dimensiones de los espacios de Hilbert de los dos subsistemas.

En el caso de los estados no puros, la situación es menos clara. El concepto de factorizabilidad no es suficiente, y se necesita una definición más general de separabilidad (como propiedad opuesta al entrelazado). Se dice que un estado (no puro en general) es separable, si su operador de estado $\hat{\rho}$ puede expresarse como combinación lineal de productos de operadores estado para cada una de las dos partes,

$$\rho = \sum_k c_k \rho_k^{(1)} \otimes \rho_k^{(2)}, \quad 0 \leq c_k \leq 1, \quad \sum_k c_k = 1.$$

Por ello, para estados no puros la distinción entre estados separables (clásicamente correlacionados) y estados no separables (cuánticamente correlacionados, es decir entrelazados) no está totalmente resuelta. En general podemos identificar estados entrelazados empleando las siguientes definiciones:

Definición 5.1. Sean $\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2, \dots, \mathcal{Q}_n$ un conjunto de sistemas cuánticos pertenecientes a los espacios de Hilbert $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \dots, \mathcal{H}_n$. Entonces el sistema cuántico global constituido por $\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2, \dots, \mathcal{Q}_n$, se dice que está entrelazado si el estado correspondiente $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \otimes_{j=1}^n \mathcal{H}_j$ “no” puede ser escrito de la forma

$$|\psi\rangle = \otimes_{j=1}^n |\psi_j\rangle.$$

Definición 5.2. Un operador ρ definido en un espacio de Hilbert \mathcal{H} , se dice que está entrelazado con respecto a la descomposición del espacio de Hilbert

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{j=1}^n \mathcal{H}_j,$$

si no puede ser escrito de la forma

$$\rho = \sum_{k=1}^l \lambda_k \bigotimes_{j=1}^n \rho_{j,k}.$$

5.3. Entropía de von Neumann

La entropía de von Neumann, se define como

$$S(\rho) = -\text{Tr} \{ \rho \ln \rho \},$$

si ρ se representa en su correspondiente descomposición espectral, la ecuación anterior se puede redefinir como¹

$$S(\rho) = - \sum_i \lambda_i \ln \lambda_i,$$

en donde λ_i son los eigenvalores de ρ , los cuales dentro de la Química Teórica² se encuentran sujetos a las siguientes condiciones,

$$\lambda_i \begin{cases} 0 \leq \lambda \leq 1 & \text{para sistemas de capa abierta} \\ 0 \leq \lambda \leq 2 & \text{para sistemas de capa cerrada} \end{cases}$$

¹La matriz densidad de primer orden de un sistema de N electrones está definida como

$$\gamma(1 | 1') = N \int \Psi(1, 2, \dots, N) \Psi^*(1, 2, \dots, N) d2 \cdots dN,$$

en donde los índices nos denotan las coordenadas espaciales y de espín de cada electrón. El conocimiento de esta matriz es suficiente para determinar las propiedades monoeléctricas del sistema. Esta matriz puede ser definida en términos de un conjunto ortonormal de espín orbitales de la siguiente manera:

$$\gamma(1 | 1') = \sum_{i,j} C_i C_j^* \phi_i(1) \phi_j^*(1'),$$

la cual puede ser diagonalizada para obtener

$$\gamma(1 | 1') = \sum_j \lambda_j \psi_j(1) \psi_j^*(1'),$$

en donde ψ_j son los espín orbitales naturales y λ_j son los números de ocupación. Integrando sobre las coordenadas de espín obtenemos

$$\gamma(r | r') = \sum_j \lambda_j \int \psi_j(1) \psi_j^*(1) ds_1 ds_2 \cdots dN,$$

con lo cual generamos la matriz densidad de primer orden libre de espín

$$\gamma(r | r') = \sum_i \lambda_i \varphi_i(1) \varphi_i^*(1),$$

en donde cada uno de los elementos diagonales puede ser expresado como

$$\rho_i(r) = \lambda_i |\varphi_i|^2,$$

considerando esto, la entropía de von Neumann: $-\text{Tr} \{ \rho \ln \rho \}$ es:

$$S(\rho) = - \sum_i \lambda_i \ln \lambda_i.$$

²Estas condiciones solo se cumplen cuando las probabilidades atómicas (números de ocupación) se obtienen con una metodología monodeterminantal.

y

$$\sum_i \lambda_i = N_T,$$

en donde N_T es el número de electrones. Por tanto la manera de calcular la entropía de von Neumann en Química (empleando los eigenvalores de la matriz densidad de primer orden), está dada por la siguiente expresión

$$S(\rho) = - \sum_i \frac{\lambda_i}{N_T} \ln \frac{\lambda_i}{N_T}.$$

A continuación se presentan las propiedades generales de la entropía de von Neumann, las demostraciones formales pueden ser consultadas en las referencias [2, 17, 42, 54, 68, 89].

Propiedad 5.1. *La entropía de von Neumann es “no negativa”. La entropía de un estado puro es cero, si y sólo si, el estado es un estado puro.*

Propiedad 5.2. *En un espacio de Hilbert \mathcal{H} de dimensión N la entropía tendrá un valor máximo de $\ln N$ si y sólo si el sistema está uniformemente distribuido, $\frac{1}{N}$.*

Propiedad 5.3. *Si $\rho_{12} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_{12})$ es un estado puro, entonces*

$$S(\rho_1) = S(\rho_2).$$

En general se suele enunciar esta propiedad diciendo que si un sistema compuesto está en un estado cuántico puro, entonces las entropías de los subsistemas que lo componen son iguales.

Propiedad 5.4. *La entropía de un producto tensorial, cumple*

$$S(\rho \otimes \sigma) = S(\rho) + S(\sigma),$$

en donde $\rho, \sigma \geq 0$.

Esta propiedad nos indica que si tenemos dos subsistemas “independientes” descritos por $\rho \in \mathcal{H}_1$ y $\sigma \in \mathcal{H}_2$, entonces la información total del sistema, será la suma de información contenida en sus subsistemas.

Propiedad 5.5. *La entropía relativa es aditiva. Si $\rho_i, \gamma_i \geq 0$ con $\rho_i, \gamma_i \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, entonces,*

$$S(\rho_1 \otimes \rho_2 \parallel \gamma_1 \otimes \gamma_2) = S(\rho_1 \parallel \gamma_1) + S(\rho_2 \parallel \gamma_2).$$

Propiedad 5.6. *Si $\{p_i\}$ es una distribución de probabilidades y los estados ρ_i tienen soporte en espacios ortogonales, entonces*

$$S\left(\sum_i p_i \rho_i\right) = H(p_i) + \sum_i p_i S(\rho_i).$$

Propiedad 5.7. *Supongamos que $\{p_i\}$ es una distribución de probabilidades, $|i\rangle$ es un conjunto ortogonal de \mathcal{H}_A y $p_i \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_B)$ es un conjunto de operadores de densidad, entonces*

$$S\left(\sum_i p_i |i\rangle \langle i| \otimes \rho_i\right) = H(p_i) + \sum_i p_i S(\rho_i),$$

en donde p_i son probabilidades, $\{|i\rangle\}$ son estados ortogonales del sistema A y p_i es un conjunto de operadores de densidad de otro sistema B .

Con lo hasta ahora revisado es necesario explicar la diferencia existente entre las entropías definidas originalmente por Shannon (clásicas) y las entropías definidas por von Neumann (cuánticas). Para ello, procedamos de la siguiente manera.

En la Mecánica Cuántica tenemos que distinguir entre “estados” y “observables”. Los observables son obtenidos mediante operadores autoadjuntos definidos en el espacio de Hilbert y los estados están caracterizados por una matriz densidad ρ .

El valor esperado de un observable A que se encuentra en el estado ρ es:

$$\langle A \rangle = \text{Tr}\{\rho, A\},$$

entonces si un estado está descrito por una matriz densidad ρ , la correspondiente entropía de ese estado es

$$S(\rho) = -\text{Tr}\{\rho \ln \rho\}$$

y la entropía del observable que está en el estado ρ , está dada por

$$H(\rho, A) = -\text{Tr}\{(\rho, A) \ln(\rho, A)\}.$$

Por tanto, estas dos entropías, $S(\rho)$ y $H(\rho, A)$ *no son iguales ni equivalentes*. La primera de ellas determina la información cuántica de un sistema y está definida en términos de la matriz densidad y la segunda mide la información clásica del sistema y está definida en términos de un observable.

Ambas entropías se encuentran sujetas a

$$S(\rho) \leq H(\rho, A),$$

y será una igualdad si y sólo si $[\rho, A] = 0$. Es decir solo cuando los valores de los observables conmutan con la matriz densidad.

5.4. Transformaciones locales y globales en la Química

Una de las tareas más importantes en la Teoría de Información Cuántica aplicada a la Química Teórica, es tratar de medir y cuantificar el entrelazado. Por ello, en la presente sección se mostrarán algunos conceptos y propiedades generales, denominadas transformaciones locales, las cuales al aplicarse al estudio de un estado reducen la información del mismo.

Definición 5.3. *Transformaciones locales.*

Son transformaciones u operaciones lineales sobre los subsistemas de un estado que puede ser bi-, tri-, n-partita que se encuentra clásicamente correlacionado.

Definición 5.4. *Sistema n-partita clásicamente correlacionado.*

Son aquellos sistemas tales que pueden ser expresados de la siguiente forma general

$$\rho_{A,B,C,\dots,n} = \rho_i^A \otimes \rho_i^B \otimes \rho_i^C \otimes \dots \otimes \rho_i^N.$$

Propiedad 5.8. *Sea un estado descrito por una matriz densidad en bloques tales que los elementos de las submatrices son diagonales y ortogonales entre sí,*

$$\rho^{a,b,c,\dots,n} = \begin{bmatrix} [a] & & & & \\ & [b] & & & \\ & & [c] & & \\ & & & \dots & \\ & & & & [n] \end{bmatrix},$$

dicho estado, no puede considerarse entrelazado y puede ser considerado como un estado n-partita, $\rho_{a,b,c,\dots,n}$ que es separable y que puede ser escrito de la forma:

$$\text{Tr}\rho^{a,b,c,\dots,n} = \sum_i \text{Tr}\rho_i^a \oplus \text{Tr}\rho_i^b \oplus \text{Tr}\rho_i^c \oplus \dots \oplus \text{Tr}\rho_i^n.$$

Para contextualizar de manera adecuada esta propiedad es conveniente ver el análisis de población de Weinhold descrito brevemente en el apéndice A.

Propiedad 5.9. *El entrelazado de los sistemas no puede ser creado ni incrementado a partir de transformaciones locales [14, 96, 117, 118].*

Así, si disponemos un ensamble σ , que puede ser descompuesto en sub ensambles σ_i con probabilidades p_i , el entrelazado cumplirá que

$$E(\sigma) \geq \sum_i p_i E(\sigma_i),$$

en donde

$$\sigma_i = \frac{A_i \otimes B_i \sigma A_i^\dagger \otimes B_i^\dagger}{\text{Tr}(A_i \otimes B_i \sigma A_i^\dagger \otimes B_i^\dagger)},$$

si ahora definimos un estado ρ para obtener una entropía relativa con respecto al estado σ , y aplicamos una transformación unitaria a cada estado, entonces la entropía relativa cumplirá que

$$S(\sigma | \rho) \equiv S(U\sigma U^\dagger || U\rho U^\dagger),$$

si el estado ρ también puede ser descompuesto en i subensambles, entonces

$$\sum_i S(\sigma_i \parallel \rho_i) \leq S(\sigma \parallel \rho).$$

Propiedad 5.10. *Diagonalizar una matriz densidad para obtener la traza parcial o total de un estado bipartita ρ^{AB} reduce la información del sistema. Así, la entropía relativa de von Neumann, estará sujeta a*

$$S(\text{Tr}_A \rho^{AB} \parallel \text{Tr}_B \rho^{AB}) \leq S(\rho^B \parallel \rho^A),$$

o bien

$$S(\text{Tr} \rho^{AB}) \leq S(\rho^{AB}).$$

Propiedad 5.11. *Integrar sobre las coordenadas de espín de un estado reducido y diagonalizado, $\Gamma_{red} = \sum_i \langle \phi_i | \hat{\rho} | \phi_i \rangle = \sum_i \gamma_i$, reduce el entrelazado.*

$$S(\Gamma_{red}) \geq S\left(\sum_i \gamma_i\right).$$

Así, en términos generales dentro del ámbito de la Química Teórica, se puede considerar que una transformación local se lleva a cabo de la siguiente manera:

$$\rho \longrightarrow \rho_{red} \longrightarrow U \rho_{red} U^\dagger \longrightarrow \text{Tr}(U \rho_{red} U^\dagger) = \rho',$$

en donde ρ es un estado definido en el espacio de Hilbert, ρ_{red} es un estado reducido, también definido en el espacio de Hilbert y la operación UU^\dagger es una transformación unitaria.

La consecuencia inmediata de estas propiedades es que no se puede medir el entrelazado mediante transformaciones locales, por tanto, la única forma de medir el entrelazado es mediante transformaciones globales que entrelacen los subsistemas, para ello primeramente es necesario tener en cuenta las características de los esquemas de análisis de población de la Química Teórica así como las características que poseen y con ello seleccionar el esquema más apropiado para las aplicaciones de la Teoría Cuántica de la información a la Química Teórica y con ello generar una transformación global que en conjunto con las entropías informacionales definidas en este trabajo permita establecer si un sistema químico puede estar o no entrelazado.

En la siguiente sección se discute brevemente algunos de los análisis de población mas comunes de la Química Teórica, los cuales hemos considerado como transformaciones locales.

5.4.1. Transformaciones locales: Esquemas de átomos en moléculas (AIM)

Tras sumergirnos en un nuevo siglo, una parte del programa imaginado por Dirac, y puesto en marcha por Heitler, London, Slater, Mulliken y muchos otros, puede considerarse terminado. El nuevo escenario abierto por la aparición de métodos automáticos de cálculo permite disponer de soluciones básicamente exactas para la función de onda. Sin embargo, la mayor parte de la ingente cantidad de información que se almacena en el vector de estado de un sistema puede ser irrelevante para algunas aplicaciones o métodos de análisis impregnados con ideas clásicas. Más aún, podemos decir que la Teoría Cuántica (TC) no habla el lenguaje de la Química. En realidad, los conceptos básicos utilizados comúnmente en la Química –átomos, grupos funcionales, enlaces– siguen estando mucho más cerca del paradigma introducido por Dalton que del de la Física Cuántica. Por mucho que revistamos el lenguaje de pinceladas orbitales, o de reglas basadas en la conservación de ciertas simetrías sólo existentes en la Teoría Cuántica, el químico sigue visualizando los procesos reactivos en términos de entidades con individualidad propia que se transfieren de un lado a otro, que aceptan o donan electrones u otros grupos de átomos, y que habitan en el espacio físico. Esta hipótesis básica de existencia de objetos separables y transferibles en ${}^3\mathfrak{R}$ ha resultado ser difícilmente extraíble de los vectores de estado cuánticos, que moran en el espacio de Hilbert.

En definitiva, nos encontramos ante uno de los variados problemas epistemológicos a los que la ciencia se ha enfrentado en el último siglo. Aparecen al intentar conjugar los fenómenos emergentes situados en niveles superiores de complejidad con las teorías básicas que los gobiernan, situadas en niveles inferiores. Así la Química está dotada de un lenguaje y estructura propios, creados a partir de la sistematización de un enorme número de observaciones realizadas en un tiempo en el que la Física se encontraba fuera de su ámbito. Los intentos de aproximación entre ambos paradigmas se han producido en ambas direcciones. Por un lado, la Química se ha sumergido en la TC, y esta última ha logrado impregnar por completo el razonamiento químico habitual. ¿Cuál es el costo? A medida que progresaban las técnicas para obtener soluciones más y más precisas de la ecuación de Schrödinger, la extracción de información del vector de estado aparecía más y más ligada al uso de modelos muy simplificados. Se llega así a la paradójica conclusión de que:

“cuanto más exactos se hacen los cálculos, tanto más tienden los conceptos a desvanecerse”.

R. S. Mulliken (1965).

La historia se ha encargado finalmente de que los conceptos básicos de la Química Moderna, el enlace químico, los átomos, las moléculas, etc, se encuentren, por un lado, definidos rigurosamente en términos energéticos dentro del marco de la TC y, por otro, interpretado y utilizando un modelo de la solución mecánico-cuántica.

En el otro extremo, la Química Teórica ha tratado de fundamentar un marco compatible con la TC en el que los conceptos químicos tengan cabida natural. Para ello es necesario contraer la información presente en el vector de estado y, además, en algunos casos es necesario hacerlo en el espacio físico. Dicho proceso de reducción se encuentra permeado de ideas clásicas, al considerar que los sistemas pueden ser particionados y analizados en función de sus partes y no como un todo. Este proceso de reducción (a través de transformaciones locales) se muestra

en la Figura (5.1), el cual es aplicado en los esquemas de análisis de población de la Química Teórica. Por tanto, para analizar las interrelaciones de los sistemas a un nivel más fundamental es necesario definir una transformación global que nos permita recuperar las interrelaciones que se dan en la función de onda misma.

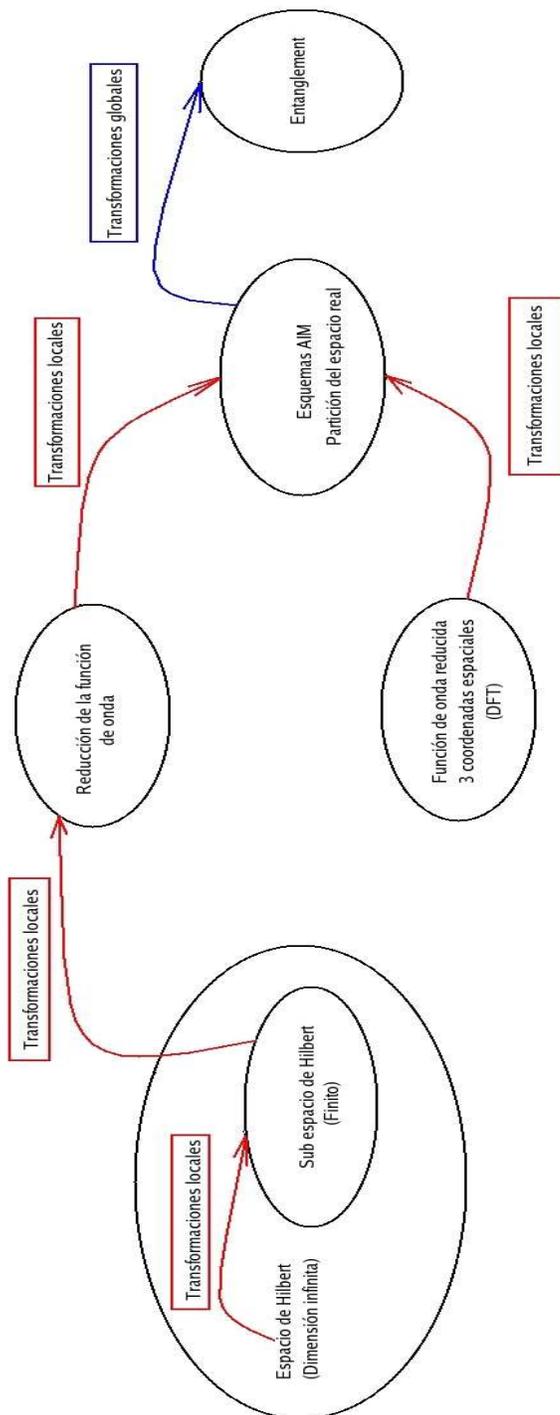


Figura 5.1: Proceso de reducción de la información por medio de transformaciones locales y recuperación de la información a través de transformaciones globales.

Este aspecto reduccionista, así como una sobre simplificación de los sistemas químicos, ha brindado la oportunidad de generar diferentes esquemas de análisis comúnmente denominados métodos de átomos en moléculas (AIM)³.

Los cuales se encuentran basados en diferentes principios, algunos de ellos con cierto grado de arbitrariedad, otros se encuentran basados en reglas heurísticas, y algunos otros presentan claras deficiencias, algunos más se han propuesto en base a las propiedades topológicas de la densidad electrónica. A continuación se da una breve descripción de algunos de los análisis de población comúnmente usados en la Química Teórica.

1. Esquema de cargas de Mulliken [73, 74].

Mulliken propuso un método que separa las contribuciones de un sistema molecular de n electrones en n_r poblaciones para las funciones de base χ_r y en poblaciones de traslape n_{r-s} para todos los posibles pares de funciones de base, de forma que la suma de la población neta n_r mas la suma de las poblaciones de traslape es igual al número de electrones. Sin embargo, no se puede tener demasiada confianza en las poblaciones atómicas obtenidas por este método. La asignación por parte de Mulliken de la mitad de la población de traslape a cada función de base es completamente arbitraria y a veces se obtienen resultados carentes de significado físico [52, 62].

2. Esquema topológico de la densidad [12].

Es un análisis topológico de algunos campos escalares basados en la densidad electrónica que proporcionan una imagen químicamente intuitiva de los resultados mecanocuánticos. Al dividir el espacio físico en regiones atómicas e inducir relaciones de pareja entre esas regiones, las cuales se asocian con los enlaces químicos tradicionales, no obstante el problema de v -representabilidad de las densidades atómicas o de fragmentos no esta resuelto. Así mismo Bader considera que todos los observables globales son aditivamente reconstruidos a partir de los observables atómicos.

3. Átomos de Hirshfeld [43].

Es un método que consiste en generar una densidad promolecular, $\rho^{\text{pro}} = \sum_i \rho_i^{\text{at}}$, empleado como guía las coordenadas espaciales del sistema molecular en cuestión y se calculan las densidades de traslape como $w_i(r) = \frac{\rho_i^{\text{at}}}{\rho^{\text{pro}}(r)}$.

Este es uno de los esquemas de partición molecular muy empleado para el cálculo de las entropías clásicas y una de las principales ventajas dentro del ámbito de la Teoría de Información, es que dicha partición minimiza la entropía de Kullback-Leibler [76–88].

4. Números de ocupación de Löwdin [64–67].

Este tipo de números de ocupación se obtienen de la expansión natural propuesta por Löwdin, a partir de la cual se genera la correspondiente matriz densidad y se diagonaliza para obtener $\rho = \sum_i^n \chi_i \psi_i \psi_i^*$, en donde ψ_i son los correspondientes espín orbitales y

³Durante la última década algunos investigadores de la Química Teórica y Computacional, erróneamente han denominado esquema AIM al análisis topológico de la densidad electrónica propuesto por R. Bader [12], sin embargo es conveniente aclarar que los esquemas AIM son “*todos*” los esquemas de análisis disponibles, tales como, Mulliken [73, 74], Hirshfeld [43], Löwdin [64–67], Weinhold [103], Löwdin-Davidson [20], entre otros, por ello en este trabajo consideramos los esquemas AIM como todos los esquemas antes mencionados y no solamente al esquema de R. Bader.

χ_i son los números de ocupación, los cuales cumplen que $\sum_i \chi_i = N$ en donde N es el número de electrones. Ahora bien, la matriz de densidad se reduce de acuerdo a las transformaciones irreducibles del grupo puntual de la molécula mediante orbitales moleculares y no está diagonalizada en bloques atómicos que se reducen a la simetría orbital de cada átomo motivo por el cual no es posible estudiar la interacción entre subsistemas en esta representación.

Existen esquemas más apropiados para las aplicaciones químicas de este trabajo, cuyas características se listan a continuación:

1. Orbitales naturales atómicos (NAO) de Weinhold [103].

Este esquema es considerado una mejora sustancial al esquema de análisis de población de Mulliken [52,62] y es comúnmente conocido como el método NBO (Natural Bond Orbitals) en cuya construcción se generan también los NAO's (Natural Atomic Orbitals) que son convenientes para las aplicaciones de este trabajo, debido a que poseen las siguientes características:

- a) Son orbitales ortonormales de máxima ocupación, que se obtienen de subbloques de simetría atómica de la matriz densidad de primer orden, localizados en cada átomo.
- b) Al ser ortogonales nunca tienen ocupaciones negativas y suman correctamente al número de electrones.
- c) Al obtenerse de bloques atómicos reflejan la descripción más compacta de la densidad alrededor del átomo aislado al que corresponden.
- d) La densidad de los NAO es v -representable al obtenerse de bloques atómicos de la matriz densidad de primer orden y corresponden al potencial generado por el hamiltoniano del átomo aislado.
- e) Al obtenerse de bloques de la matriz densidad de primer orden reflejan propiedades intrínsecas de la función de onda y, por tanto, no tienen una fuerte dependencia de la elección de la base.
- f) Son invariantes rotacionalmente, lo cual es apropiado para definir los subsistemas B y A empleados en cada una de las entropías.
- g) A diferencia de los números de ocupación de Löwdin no están deslocalizados en todo el orbital molecular y no se transforman como representaciones irreducibles del grupo puntual molecular y por tanto, permiten el estudio de los subsistemas atómicos y su interacción.
- h) En este esquema se hace una clasificación de los orbitales en *Core*, *Valencia* y *Rydberg*. Los de core y valencia reflejan la ocupación del átomo aislado, mientras en los Rydberg radica la deslocalización del átomo.
- i) Cada número de ocupación tiene sentido químico al reflejar propiedades atómicas, o bien de enlace e hibridación mediante los NBO (Natural Bond Orbitals), los cuales se obtienen ajustando orbitales de enlace a la estructura de Lewis de la molécula (ver ref. [103]).

j) Para la distribución electrónica en los orbitales se tiene en cuenta la estructura de Lewis del sistema.

2. El esquema Löwdin-Davidson [20].

Este esquema, posee las siguientes propiedades:

- a)* Son orbitales ortonormales atómicos (en un solo centro) de máxima ocupación, que se obtienen de subbloques de simetría angular atómica de la matriz densidad de primer orden, localizados en cada átomo.
- b)* Al ser ortogonales nunca tienen ocupaciones negativas y suman correctamente al número de electrones.
- c)* Al obtenerse de bloques atómicos reflejan la descripción más compacta de la densidad alrededor del átomo aislado al que corresponden.
- d)* La densidad de los orbitales atómicos es v -representable al obtenerse de bloques atómicos de la matriz densidad de primer orden y corresponden al potencial generado por el hamiltoniano del átomo aislado.
- e)* Al obtenerse de bloques de la matriz densidad de primer orden reflejan propiedades intrínsecas de la función de onda y por tanto no muestran fuerte dependencia de la elección de la base.
- f)* Son invariantes rotacionalmente.

Es importante mencionar que hemos mostrado recientemente [21] que estos últimos esquemas resultan apropiados para describir probabilidades atómicas en el contexto de la Teoría Cuántica de la Información al poderse representar en el espacio de Hilbert y surgir de un principio variacional de Euler-Lagrange que minimiza un funcional entrópico de von Neumann.

También es digno mencionar que actualmente ningún esquema de tipo AIM en espacio euclidiano nos permite realizar mediciones de entrelazado porque no hay esquema clásico que incorpore superposición cuántica sin evitar transformaciones locales que destruyan el entrelazado al particionar el sistema, sin mencionar las desventajas teóricas que poseen este tipo de esquemas reduccionistas anteriormente mencionados.

En esta Tesis se empleó el análisis de población de Weinhold para obtener las probabilidades atómicas naturales, las cuales mediante una transformación global nos permitieron definir un nuevo tipo de entropías de von Neumann que pueden detectar el entrelazamiento de los sistemas químicos, las cuales se discutirán en la siguiente sección.

5.4.2. Transformaciones globales en la Química

Para analizar las interrelaciones que se dan en la función de onda es necesario definir una transformación global que nos permita analizar un sistema como un todo y no en función de sus partes. Para lo cual es necesario recurrir a un esquema de análisis de población y en seguida aplicar una transformación global de forma que las entropías informacionales definidas con esta transformación global nos permitan analizar las correlaciones tanto clásicas como cuánticas. Por ello en el presente trabajo definimos, caracterizamos y aplicamos un nuevo tipo de entropías que nos permiten estudiar la interacción entre dos subsistemas A y B , lo cual nos ha permitido estudiar las correlaciones clásicas y cuánticas en sistemas y procesos químicos.

5.4.3. Probabilidades atómicas

Consideremos un estado bipartita Ψ_{AB} con el cual es posible definir una matriz densidad Γ_{AB} , a partir de dicha matriz se obtienen los conjuntos $\{p(A)\}_i^n, \{p(B)\}_j^m \in \mathcal{H}_{12}$ en donde $\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Para obtener los conjuntos buscados se procede a definir un par de operadores de traza parcial \hat{O}_A y \hat{O}_B que al aplicarlos sobre la matriz Γ_{AB} tendremos como resultado los conjuntos $\{p(A)\}$ y $\{p(B)\}$, esto es

$$\begin{aligned} \text{Tr} \hat{O}_A \Gamma_{AB} &= \sum_i^n a_i |\psi_{a_i}\rangle \langle \psi_{a_i}| \otimes \prod_j \langle \psi_{b_j} | | \psi_{b_j} \rangle, \\ &= \{p(A)\}_{i=1}^n, \\ \text{Tr} \hat{O}_B \Gamma_{AB} &= \sum_{j=n+1}^m b_j |\psi_{b_j}\rangle \langle \psi_{b_j}| \otimes \prod_i \langle \psi_{a_i} | | \psi_{a_i} \rangle, \\ &= \{p(B)\}_{j=1}^m, \end{aligned}$$

en donde, los elementos de $\{p(A)\}, \{p(B)\} \in \mathcal{H}_{12}$, además $p_i(A), p_j(B) \in \mathbb{R} : 0 \leq p_i(A), p_j(B) \leq 2$ y $\sum_{i=1}^n p_i(A) = N_A, \sum_{j=1}^m p_j(B) = N_B$ en donde N_A y N_B es el número de electrones de los subsistemas A y B respectivamente y además cumplen que $N_A + N_B = N_T$ y N_T es el número total de electrones del sistema, estos conjuntos se normalizan a la unidad de forma que $\sum_{i=1}^n \frac{p_i(A)}{N_A} = 1$ y $\sum_{j=1}^m \frac{p_j(B)}{N_B} = 1$. Con esto se obtienen los conjuntos de “probabilidades atómicas naturales” $\{P_i(A)\}$ y $\{P_j(B)\}$, las cuales se emplean para el cálculo de las entropías informacionales.

Por otra parte, la Teoría de la Información se encuentra basada en experimentos probabilísticos, los cuales pueden tener n salidas o eventos, denotados por a_1, a_2, \dots, a_n a los cuales se encuentran asignados ciertos valores de probabilidad P_1, P_2, \dots, P_n que a su vez satisfacen las siguientes condiciones de normalización:

$$\sum_{i=1}^n P_i(A) = \sum_{j=1}^m P_j(B) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j}(A, B) = \sum_{i=1}^n P_{i,j}(A | B) = \sum_{j=1}^m P_{i,j}(B | A) = 1. \quad (5.2)$$

Dado que no se dispone de una definición de la probabilidad conjunta $P_{i,j}(A, B)$ para sistemas correlacionados, la hemos definido a través de una transformación global que correlaciona $n \times m$ estados:

$$P_{i,j}(A, B) = \frac{P_i(A) + P_j(B)}{n + m}, \quad (5.3)$$

y que cumple

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j}^{n,m} \frac{P_{i,j}(A, B)}{n+m} &= \sum_i^n \sum_j^m \left\{ \frac{P_i(A) + P_j(B)}{n+m} \right\} \\
&= \frac{\sum_i^n P_i(A) \left\{ \sum_j^m \right\} + \sum_j^m P_j(B) \left\{ \sum_i^n \right\}}{n+m} \\
&= \frac{n+m}{n+m} \\
&\equiv 1,
\end{aligned}$$

en donde n y m son las dimensiones de los conjuntos $\{A\}$ y $\{B\}$ respectivamente.

Esta definición (Ec. 5.3) es una *transformación global* que nos permite medir el entrelazado en un sistema químico, no es única pero resulta apropiada porque nos permite preservar las relaciones clásicas de la Teoría de Información. Este tipo de probabilidad conjunta (Ec. 5.3) cumple la siguiente propiedad de marginalidad:

$$\begin{aligned}
P_j(B) &= \sum_i^n P_{i,j}(A, B) \\
&= \sum_i^n \{P_i(A) + P_j(B)\} \\
&= \sum_i^n P_i(A) + \sum_i^n P_j(B) \\
&= 1 + P_j(B) \left\{ \sum_i^n \right\} \\
&= 1 + (P_j(B) \times n).
\end{aligned}$$

La probabilidad conjunta, además, se encuentra vinculada con la probabilidad condicional de la siguiente manera:

$$P_{i,j}(A | B) = \frac{P_{i,j}(A, B)}{\sum_i P_{i,j}(A, B)}, \quad (5.4)$$

$$P_{j,i}(B | A) = \frac{P_{i,j}(A, B)}{\sum_j P_{i,j}(A, B)}, \quad (5.5)$$

además es invariante operacionalmente, es decir

$$P_{i,j}(A, B) \equiv P_{j,i}(B, A), \quad (5.6)$$

mientras que la probabilidad condicional

$$P_{i,j}(A | B) \neq P_{j,i}(B | A). \quad (5.7)$$

La probabilidad condicional marginal cumple (Ecs. 5.4 y 5.5):

$$\sum_i P_{i,j}(A | B) = \frac{\sum_i^n P_{i,j}(A, B)}{\sum_i^n P_{i,j}(A, B)} = \frac{\sum_i^n P_i(A) + P_j(B) \sum_i^n}{\sum_i^n P_i(A) + P_j(B) \sum_i^n} = \frac{1 + P_j(B) \times n}{1 + P_j(B) \times n} \equiv 1,$$

las entropías informacionales que se definen empleando este tipo de probabilidad las denominamos *marginales* y las hemos denotado con la letra H . La probabilidad conjunta cumple importantes propiedades que determinan el tipo de entropías que se pueden definir, por ejemplo, es directo mostrar que la probabilidad condicional $P_{ij}(A | B)$ es menor o igual a uno si no cumple con la condición de marginalidad (5.2) y que puede adquirir cualquier signo si se libera la restricción de marginalidad:

$$\begin{aligned} \sum_i P_{i,j}(A | B) &= \frac{\sum_i P_{i,j}(A, B)}{P_j(B)} \\ &= \frac{\sum_i (P_i(A) + P_j(B))}{(m+n)P_j(B)} \\ &= \left(\frac{\sum_i (P_i(A) + P_j(B))}{P_j(B)} \right) \left(\frac{1}{n+m} \right) \\ &= \left(\frac{\sum_i P_i(A) + P_j(B) \sum_i}{P_j(B)} \right) \left(\frac{1}{n+m} \right) \\ &= \left(\frac{1 + n \times P_j(B)}{P_j(B)} \right) \left(\frac{1}{n+m} \right) \\ &= \frac{\frac{1}{P_j(B)} + n}{n+m}, \end{aligned}$$

por lo tanto se concluye que

$$\sum_i P_{i,j}(A | B) \leq 1.$$

Esto nos conduce inmediatamente a un nuevo tipo de probabilidad condicional, que se denomina como *no marginal* y al definir las entropías informacionales en términos de este tipo de probabilidades obtendremos las entropías *no marginales* y las denotamos con la letra R . En las siguientes secciones se dan las definiciones y propiedades de estas entropías.

5.4.4. Entropías de von Neumann marginales tipo H

Empleando la probabilidad conjunta definida por nosotros, la cual ha sido discutida en la sección anterior, hemos definido un nuevo tipo de entropías de von Neumann (cuánticas) que utilizan la marginalidad de la probabilidad conjunta. A este tipo de medidas de información las hemos denotado con la letra H porque conserva todas las propiedades de la Teoría de Información Clásica.

Definición 5.5. *Sea un evento probabilístico dado por $P_{i,j}(A, B)$, entonces la información del evento A , será*

$$H(A) = - \sum_i \sum_j P_{i,j}(A, B) \ln \sum_j P_{i,j}(A, B),$$

y la información del evento B , estará dada por

$$H(B) = - \sum_i \sum_j P_{i,j}(A, B) \ln \sum_i P_{i,j}(A, B).$$

Definición 5.6. *La información del experimento A condicionada por el experimento B es:*

$$H(A | B) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j}(A, B) \ln P_{i,j}(A | B). \quad (5.8)$$

De manera similar tenemos;

$$H(B | A) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j}(A, B) \ln P_{i,j}(B | A). \quad (5.9)$$

Definición 5.7. *La información de un evento probabilístico conjunto dado por $P_{i,j}(A, B)$, será*

$$H(A, B) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j}(A, B) \ln P_{i,j}(A, B). \quad (5.10)$$

Definición 5.8. *La información común de un par de eventos probabilísticos está dada por*

$$H(A : B) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j}(A, B) \ln \frac{P_{i,j}(A, B)}{\sum_j P_{i,j}(A, B) \sum_i P_{i,j}(A, B)}. \quad (5.11)$$

Propiedad 5.12. $H(A | B) \leq H(A)$ que será una igualdad si y solo si A y B son independientes.

Propiedad 5.13. *La entropía de un grupo de experimentos probabilísticos correlacionados cumple:*

$$H(A, B) = H(A) + H(B | A) = H(B) + H(A | B). \quad (5.12)$$

Propiedad 5.14. $H(A : B) \geq 0$ y será una igualdad si y sólo si los eventos son independientes.

Propiedad 5.15. *Para dos experimentos probabilísticos, la información común cumplirá;*

$$H(A : B) = H(A) - H(A | B) = H(B) - H(B | A) = H(B : A). \quad (5.13)$$

Las Ecs. (5.12 y 5.13), de acuerdo con Guiaşu [42] pueden interpretarse como “*un balance de información*” del sistema.

En la Figura (5.2) se muestra mediante diagramas de Venn los posibles casos que pueden presentarse del comportamiento de estas entropías. En el capítulo 6, se presentan algunos ejemplos didácticos y en el apéndice A se presenta el uso del análisis de población de Weinhold H en este trabajo.

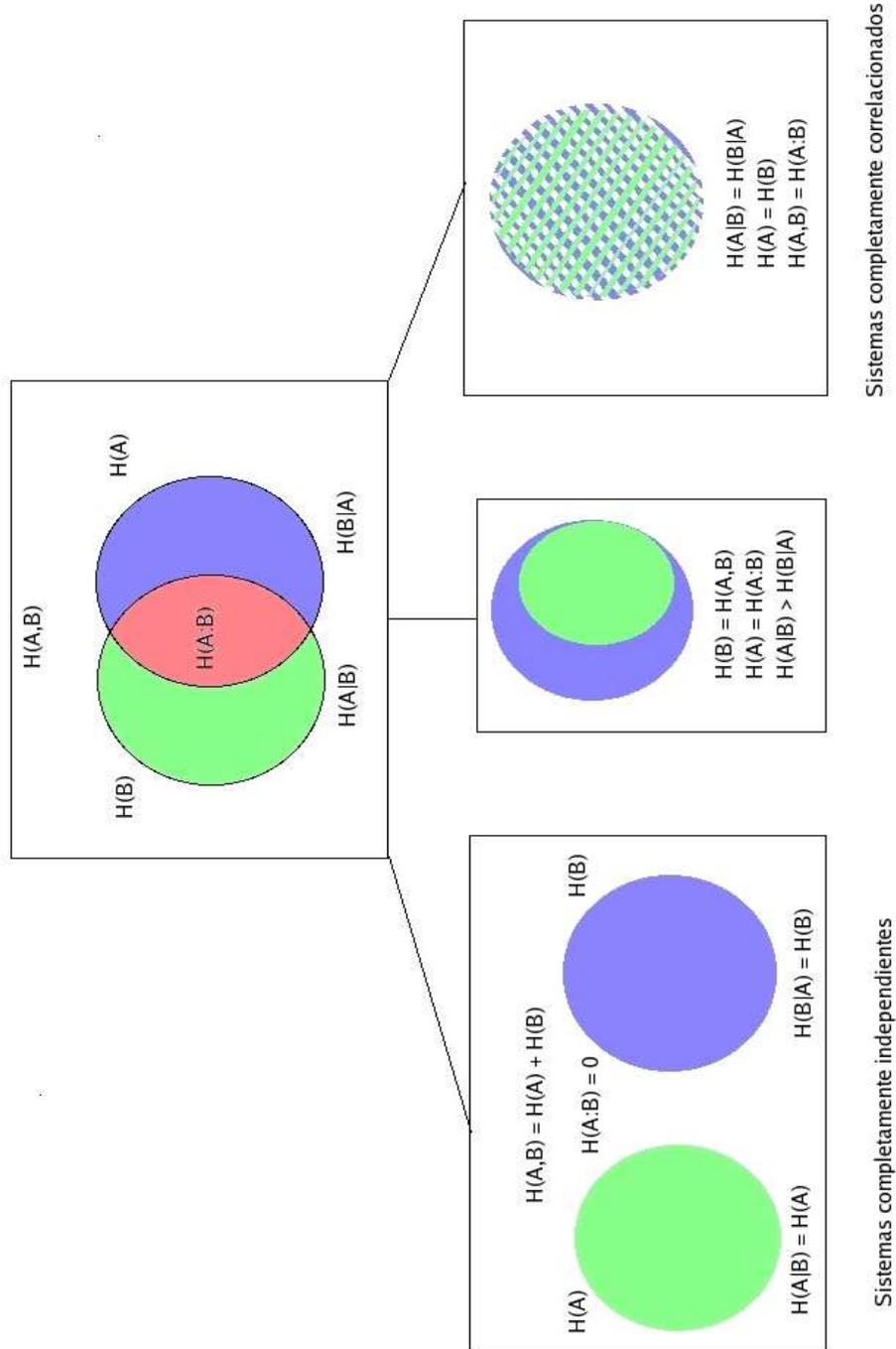


Figura 5.2: Diagramas de Venn de un sistema bipartita clásicamente correlacionado.

5.4.5. Entropías de von Neumann no marginales tipo R

Cuando se libera la restricción de la marginalidad en la probabilidad conjunta se obtienen las entropías no marginales, este tipo de probabilidad ha sido muy poco estudiada dentro del contexto de la Teoría de Información. Como veremos, con este tipo de entropías se puede determinar si un sistemas posee o no algún tipo de comportamiento cuántico mediante la negatividad de la entropía condicional o mediante la violación de algunas de las cotas establecidas en la Teoría Clásica de la Información [89].

En la Teoría Cuántica de la Información, A. K. Rajagopal y colaboradores [1, 101] han sido pioneros en abordar la problemática de la localidad, separabilidad y la no marginalidad, por ello hemos optado por denotar a las entropías no marginales propuestas en este trabajo mediante la letra R y nos referiremos a ellas como entropías tipo R ó bien como entropías no marginales. La probabilidad conjunta empleada para definir estas entropías cumple,

$$\sum_i^n \sum_j^m P_{i,j}(A, B) = \sum_i P_i(A) = \sum_j P_j(B) = 1, \quad (5.14)$$

sin embargo, en este caso hemos mostrado anteriormente (ver la pág. 47) que la probabilidad condicional:

$$\sum_i P_{i,j}(A | B) \begin{matrix} \leq \\ \geq \end{matrix} 1 \quad (5.15)$$

o

$$\sum_j P_{j,i}(B | A) \begin{matrix} \leq \\ \geq \end{matrix} 1. \quad (5.16)$$

Las Ecs. (5.15) y (5.16) implican que las entropías condicionales pueden ser positivas, negativas o cero, y de acuerdo a Rajagopal [101], “*sólo cuando la noción de probabilidad condicional puede ser definida entonces la entropía condicional será positiva*”.

Así, la negatividad de las entropías condicionales ha sido atribuida como una característica de los sistemas entrelazados, que ocurre cuando se viola alguna desigualdad de Bell [22] y ha sido interpretada como un potencial para adquirir información [23] cuando el sistema está cuánticamente correlacionado es decir, cuando el sistema está entrelazado. En la actualidad se han hecho intentos por tratar de cuantificar el entrelazado en sistemas moleculares sencillos [50, 122]. Sin embargo para sistemas moleculares más complejos y procesos químicos hemos reportado [36] que los cambios del entrelazado describen zonas de ruptura de enlaces, formación de enlaces, acumulación y remoción de carga.

Las definiciones de las entropías tipo R , son:

Definición 5.9. *Sea un evento, caracterizado por una probabilidad conjunta $P_{i,j}(A, B)$ ⁴. La entropía no marginal del evento A estará dada por*

$$R(A) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j}(A, B) \ln P_i(A)$$

⁴De igual manera que en las entropías tipo H , las probabilidades de cada una de estas entropías, se normalizan a la unidad.

y la entropía del evento B , será

$$R(B) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j}(A, B) \ln P_j(B).$$

Definición 5.10. Sea un evento descrito por una distribución de probabilidad conjunta $P_{i,j}(A, B)$, que puede interpretarse como; la información del evento A condicionada por el evento B , será:

$$R(A | B) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j}(A, B) \ln \frac{P_{i,j}(A, B)}{P_j(B)}.$$

mientras que la información del evento B condicionada por el evento A , será

$$R(B | A) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j}(A, B) \ln \frac{P_{i,j}(A, B)}{P_i(A)}.$$

Definición 5.11. La entropía de una distribución probabilística conjunta $P_{i,j}(A, B)$, será

$$R(A, B) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j}(A, B) \ln P_{i,j}(A, B),$$

la cual puede ser escrita también de la siguiente forma:

$$R(A, B) = R(A) + R(B | A) = R(B) + R(A | B).$$

Definición 5.12. La información común de una distribución de probabilidad conjunta, $P_{i,j}(A, B)$, será

$$R(B : A) = R(B) - R(B | A) = R(A) - R(A | B),$$

la cual también puede ser escrita como

$$R(B : A) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m P_{i,j}(A, B) \ln \frac{P_{i,j}(A, B)}{P_i(A)P_j(B)}.$$

Las definiciones (5.11) y (5.12) se han denominado como *balances de información* [42]. Las cuales tienen las siguiente propiedades:

Propiedad 5.16. Para cualquier distribución conjunta no marginal, $P_{i,j}(A, B)$, $R(A | B) \leq 0$, y $R(B | A) \leq 0$.

Esta propiedad puede ser demostrada teniendo en cuenta la definición de la probabilidad condicional,

$$\begin{aligned} P(A | B) &= \frac{P_{i,j}(A, B)}{P_j(B)} \\ &= \frac{P_i(A) + P_j(B)}{P_j(B)} \\ &= \frac{P_i(A)}{P_j(B)} + 1, \end{aligned}$$

por tanto,

$$P(A | B) \underset{\geq}{\leq} 1,$$

consecuentemente,

$$R(A | B) \underset{\geq}{\leq} 0,$$

de manera análoga, tendremos que $R(B | A) \underset{\geq}{\leq} 0$ ■.

La negatividad de la entropía condicional es una de las propiedades más importantes de las entropías que hemos propuesto en el presente trabajo. Este comportamiento anómalo de las entropías condicionales, ha sido interpretado como un “*potencial para adquirir información*” [23].

Así negatividad de las entropías condicionales implica algún tipo de violación de las desigualdades de Bell [22] y de las cotas de la Teoría de la Información Clásica, por ello este tipo de entropías pueden ser empleadas para detectar el entrelazado de los sistemas.

De estas entropías, hemos encontrado las siguientes cotas:

1. $R(B) \leq 0$.
2. $R(A) \leq 0$.
3. $R(B | A) \underset{\geq}{\leq} 0$.
4. $R(A | B) \underset{\geq}{\leq} 0$.
5. $R(B | A) < R(B)$.
6. $R(A | B) < R(A)$.
7. $R(B, A) \leq R(B) + R(A)$.
8. $R(B : A) \leq 0$.

a partir de las cuales podemos tener los casos mostrados en la Figura (5.3).

En la siguiente capítulo se presentan algunos ejemplos didácticos que nos permitieron analizar el comportamiento de las entropías marginales y no marginales lo cual nos permitió establecer las cotas generales de este tipo de entropías. En el apéndice A, pág. 147 se discute el uso del análisis de población de Weinhold [103] en este trabajo y se muestra un ejemplo de como calcular las entropías marginales y no marginales a partir de un cálculo de estructura electrónica.

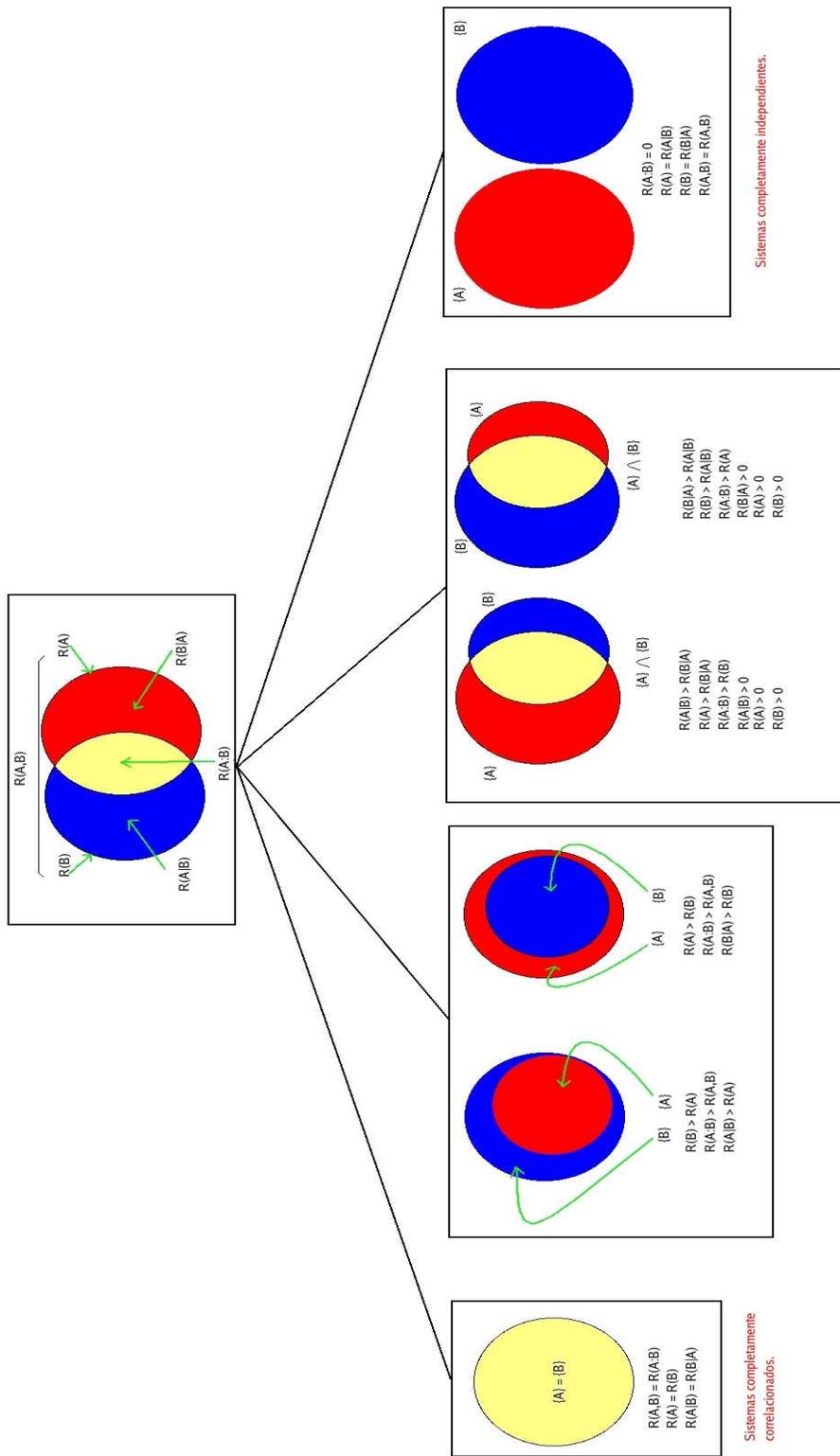


Figura 5.3: Diagramas de Venn del comportamiento de un sistema bipartita cuánticamente correlacionado.

Capítulo 6

Caracterización de las entropías marginales y no marginales

En esta sección se presentan casos prácticos que nos permitirán ejemplificar el uso de las entropías de von Neumann. Con este tipo de ejemplos podemos visualizar mediante diagramas de Venn y diagramas de entrecruzamiento, cuales son las propiedades que nos permiten medir este tipo de entropías, así como anticipar el uso potencial de las mismas.

El objetivo principal de esta sección es estudiar correlaciones (clásicas y cuánticas) en sistemas “ideales o modelos” con función de onda constante en los que se varía el nivel de interacción entre subsistemas. Con ello se pretende mostrar que existen dos niveles de correlación, uno es el tipo de correlación coulombica y el otro es un tipo de correlación más general que es el entrelazado, así como algunas igualdades tanto en las entropías tipo H como en las entropías tipo R . Para llevar a cabo la caracterización de las entropías tipo H y tipo R consideramos el etano, teniendo en cuenta el siguiente *modelo*.

Sea una función de onda *fija*¹ y se emplea la metodología de Weinhold [103] para obtener un conjunto $\{C\}$ de eigenvalores tales que se cumplen $\sum_{k=1} \{C_k\} = N_T$ y que al normalizar este conjunto se obtienen las probabilidades atómicas naturales $\{P_k(C)\}$ y que cumple $\sum_{k=1} \{\frac{C_k}{N_T}\} = 1$. A partir de este conjunto se definen un par de sub conjuntos $\{P_i(A)\}$ y $\{P_i(B)\}$ en donde $i = 2, 3, 4, \dots M$ nos denota el número de elementos de cada conjunto y con cada conjunto generado se calcularon las entropías marginales y no marginales, así para obtener el primer punto de las tendencias se seleccionan un par de probabilidades atómicas naturales, de forma que se definen los conjuntos $\{A'\}_1 = \{P(A_1), P(A_2)\}$ y $\{B'\}_1 = \{P(B_1), P(B_2)\}$, en el segundo punto se definen los conjuntos $\{A'\}_2 = \{P(A_1), P(A_2), P(A_3)\}$ y $\{B'\}_2 = \{P(B_1), P(B_2), P(B_3)\}$, etc. Mediante el mismo procedimiento se definió otro esquema para generar estos conjuntos, en cuyo caso el primer punto de la tendencia lo constituyen los conjuntos $\{A'\}_1 = \{P(A_1), P(A_2)\}$ y $\{B'\}_1 = \{P(B_1), P(B_2), \dots, P(B_M)\}$, el segundo punto esta dado por $\{A'\}_2 = \{P(A_1), P(A_2), P(A_3)\}$ y $\{B'\}_2 = \{P(B_1), P(B_2), \dots, P(B_M)\}$, etc. En el cuadro (6.1) se muestran los esquemas de cálculo de las entropías² (marginales y no marginales).

¹Al obtener y seleccionar una determinada función de onda, automáticamente se fijaran todas las propiedades del sistema en cuestión.

²En el apéndice A se muestra un ejemplo detallado del cálculo de las entropías marginales y no marginales a partir de un cálculo de estructura electrónica.

Primer esquema de cálculo de las entropías.		
Entropía.	Dimensión de $\{A\}$.	Dimensión de $\{B\}$.
S_1	2	2
S_2	3	3
S_3	4	4
\vdots	\vdots	\vdots
S_n	M	M

Segundo esquema de cálculo de las entropías.		
Entropía	Dimensión de $\{A\}$.	Dimensión de $\{B\}$.
S_1	2	M
S_2	3	M
S_3	4	M
\vdots	\vdots	\vdots
S_n	M	M

Cuadro 6.1: Primer y Segundo esquema de cálculo para el primer caso de la caracterización de las entropías marginales y no marginales. S_n son las entropías (tipo H y R) calculadas.

En la Figura (6.1) se muestra el comportamiento de las entropías tipo R para el primer caso del modelo descrito anteriormente, en el que $\{B\} = CH_3$ y $\{A\} = CH_3$, en la cual se corrobora que las entropías tipo R tienen las siguientes cotas: $R(B | A) < R(B)$, $R(A | B) < R(A)$ lo cual quiere decir que el condicionamiento de un par de eventos disminuye la entropía, también se observa en la Figura (6.1c), $H(B, A) < H(B) + H(A)$, lo que implica que “particionar” los sistemas, incrementa la entropía, y en la Figura (6.1d) se muestra que la información común, $R(B : A)$, es positiva. Al comparar $R(B, A)$ con $R(B : A)$, encontramos que, $R(B : A) > R(B, A)$, lo que nos indica que la información que los sistemas comparten es mayor que la información total del sistema, este comportamiento *no clásico* nos sugiere que la cantidad $R(B : A)$ puede ser empleada como una posible medida del *entrelazado* dentro de la Química. El entrelazado, es considerado como una *correlación más fuerte de los sistemas* [13], algo que va más allá de las correlaciones de tipo culómbico que comúnmente tratamos dentro de la Química Teórica por ejemplo, en la Figura (6.1d) $R(B : A)$ en el primer punto es mayor que cero, esto implica que, aunque clásicamente en ese punto los sistemas pueden ser considerados como independientes, la información mutua tipo R nos proporciona evidencia de que hay algún tipo de correlación entre los subsistemas, como se mostrará más adelante, en el segundo esquema de análisis, esta situación se hace más evidente.

Analizando este resultado con el debido cuidado, nos lleva a las largas discusiones de índole metafísica de la Mecánica Cuántica, *no importa que tan separados estén los sistemas, siempre están correlacionados*. Esto, evidentemente, implica discutir una controversia; en el momento en el que se define el sistema como tal, éste estará correlacionado, por tanto para definir un sistema es necesario recurrir al postulado del colapso de la función de onda³ y tratar de establecer cómo es que dicho colapso se lleva a cabo o cómo es que puede ser inducido de manera natural, lo cual no lleva inmediatamente a la problemática de la Teoría Cuántica de la Medición.

En la Figura (6.2) se muestran las comparaciones de las diferentes cantidades entrópicas. En las Figuras (6.2a y 6.2b) se corrobora que $H(B | A) < H(B)$ y $H(A | B) < H(A)$ para puntos mas allá del inicial, en el punto inicial encontramos que $H(B | A) = H(B)$ y $H(A | B) = H(A)$ lo cual implica que inicialmente los sistemas no tienen ningún tipo de correlación (son independientes), asimismo esto concuerda con la Figura (6.2d) en la que $H(B : A) = 0$, lo que implica que los subsistemas son separables⁴.

Al comparar las Figuras (6.1d) y (6.2d), notamos que $R(B : A) > H(B : A)$. Dentro de las aplicaciones e interpretaciones de estas dos cantidades tenemos que la información mutua $R(B : A)$, o bien $H(B : A)$, pueden ser interpretadas como una medida de correlación de los sistemas. Tal desigualdad, sugiere que $R(B : A)$ mide algún tipo de correlación más fuerte que $H(B : A)$ por ello tal cantidad puede ser empleada como una medida del entrelazado en sistemas químicos.

Otro aspecto importante de las entropías tipo R , se muestra en las Figuras (6.1a, 6.1b y 6.1d), en las cuales se observa que $R(B : A) > R(B, A)$, lo cual es un comportamiento no clásico y la entropía condicional, $R(B | A) < 0$. Esta negatividad de las entropías condicionales ha sido interpretada como un *potencial para adquirir información*, es decir cuando el sistema *no esta correlacionado clásicamente*, este potencial permite a los subsistemas obtener información el uno del otro sin la necesidad de un canal clásico [23, 48].

³Ver el capítulo 5, pág 25.

⁴Véase la propiedad 5.14 en la pág. 49.

En las Figuras (6.3) y (6.4) se muestran las tendencias de las entropías informacionales obtenidas con el segundo esquema de llenado. En las Figuras (6.3a) las entropías condicionales son negativas por tanto el sistema se encuentra *cuánticamente correlacionado*. En las Figuras (6.3a) y (6.3b) notamos que la diferencia entre $R(B | A)$ y $R(B)$, así como $R(A | B)$ y $R(A)$ es constante. Tal situación, nos lleva a inferir que el entrelazado puede ser constante para cada sistema, por tanto no puede ser incrementado y además podría ser único para cada especie química.

Las Figuras (6.4a–6.4d) corresponden a las entropías tipo H , en las Figuras (6.4a) y (6.4b) se observa como para el primer punto del proceso en cuestión, se cumple que $H(B | A) = H(B)$ y $H(A | B) = H(A)$, y se corrobora que $H(B : A) = 0$ en la Figura (6.4d) y como ya se había señalado anteriormente, esto corresponde inequívocamente a un comportamiento propio de la separabilidad de los subsistemas⁵.

En las Figuras (6.5) y (6.6) se hace una comparación de todas las entropías tipo R y tipo H . En el caso de las entropías tipo R , se puede observar que la zona negativa de la entropía condicional $R(B | A)$ corresponde a un comportamiento cuánticamente correlacionado [28], esto implica que $R(B : A) > R(B, A)$ cuyo significado es que: *la información que los subsistemas comparten, $R(B : A)$, es mayor que el total de información, $R(B, A)$, del sistema*, lo cual ha sido ampliamente discutido y observado en el ámbito de la Teoría de la Información Cuántica [23, 28, 90, 100].

Asimismo, en la Figura (6.5) hay una serie de igualdades entre las entropías informacionales, en el punto 13, encontramos que $R(B | A) = R(A)$, esta igualdad es un resultado inesperado ya que actualmente *no hay referencia alguna* en la literatura especializada de que se presente esta situación⁶. En el punto 22, encontramos las siguientes igualdades:

1. $R(B | A) = 0$.
2. $R(A | B) = R(B | A) + R(A | B)$.
3. $R(B : A) = R(A)$.

En el punto 43, encontramos que:

1. $R(B | A) = R(A | B)$.
2. $R(B) = R(A)$.

En la Figura (6.6), se muestran las entropías tipo H , las cuales, en el punto inicial, muestran que la información de los subsistemas no está correlacionada clásicamente, y tenemos las siguientes igualdades:

1. $H(B | A) = H(B)$.
2. $H(A | B) = H(A)$.
3. $H(B | A) = H(A | B)$.

⁵Ver las propiedades 5.12 y 5.14 en la pág. 49.

⁶Esto se debe a que la separabilidad de los subsistemas se logra al tener la igualdad del tipo $R(B | A) = R(B)$ (Ver la propiedad 5.12 de la pág. 49)

4. $H(B) = H(A)$.
5. $H(B, A) = H(B) + H(A) = H(B | A) + H(A | B)$.
6. $H(B : A) = 0$.

Hay varios aspectos importantes de la información mutua condicional, al comparar esta cantidad de ambos esquemas, encontramos que $R(B : A) > H(B : A)$. $R(B : A)$ varía en forma contraria a $H(B : A)$, y dado que, las entropías tipo H están relacionadas a la separabilidad de la información (un comportamiento típicamente clásico) es posible vincular $H(B : A)$ con la correlación clásica del sistema (fundamentalmente la coulombica), la cual se incrementa a medida que se incrementa el número de electrones del sistema, mientras que $R(B : A)$, en este caso disminuye, por tanto a medida que las interacciones de tipo clásico se incrementan, las interacciones de tipo no clásico se hacen menos evidentes. Como se mostrará en los ejemplos de los procesos químicos, $R(A : B)$, en general, tiende a disminuir a medida que la información se comporta clásicamente.

Por otra parte, nótese que $R(B : A)$, (Fig. 6.1d) tiene mucha más estructura que $H(B : A)$ (Fig. 6.2d), lo cual se debe al proceso de llenado de los orbitales.

En la Figura (6.7) se muestra la comparación de esta entropía $R(A : B)$ con el incremento de eventos del subsistema B , en dicha figura, se puede notar que los máximos y mínimos de esta entropía corresponden al proceso de “llenado” de cada uno de los orbitales atómicos en cuestión, es decir, el primer escalón de la tendencia N_B corresponde al llenado del orbital $1s$, posteriormente están los escalones correspondientes al “llenado” de los orbitales p_x, p_y y p_z , un punto importante en este conjunto de orbitales presentan invariancia rotacional [20], por ello, la carga de cada uno de estos orbitales es equivalente, la información mutua hace evidente esta situación, y también inferimos que el proceso en cuestión es aditivo. Posterior a esa zona de los orbitales p sigue un zona de orbitales d , los cuales no tienen estructura y sólo se nota un incremento constante y equivalente en la información, la cual la hemos considerado como información *redundante*, tal clasificación concuerda con las ideas de la invariancia rotacional (los orbitales p_x, p_y y p_z son completamente equivalentes) y por tanto si tenemos n copias idénticas de un sistema ζ_i , la información total será $\approx \sum_{i=1}^n \zeta_i$.

En la Figura (6.8) se muestra la comparación de la información mutua tipo H con los electrones del subsistema B , esta cantidad se incrementa de manera proporcional al incremento del número de electrones, por ello, tal entropía la hemos considerado como una medida de la correlación electrónica del sistema.

Ambos esquemas de entropías (marginales y no marginales), cumplen con las cotas obtenidas originalmente por Shannon, siendo las entropías marginales las que cumplen con tales cotas cabalmente y en ningún caso hemos observado incumplimiento alguno. Mientras que las entropías tipo R pueden cumplir o no las cotas de la teoría clásica de la información, lo cual se puede observar en que, las entropías condicionales nunca se reducen a las entropías de los subsistemas, esto es; $R(B | A) \neq R(B)$ y $R(A | B) \neq R(A)$, esto implica que los subsistemas siempre están correlacionados, contrario a lo que señala el modelo original de Shannon.

Finalmente, las entropías tipo R , pueden manifestar el comportamiento cuántico de los sistemas, la información mutua condicional, $R(B : A)$, puede ser considerada como una medida del entrelazado en sistemas químicos, mientras que la información mutua $H(B : A)$, puede ser empleada como una medida de la correlación electrónica de los sistemas químicos.

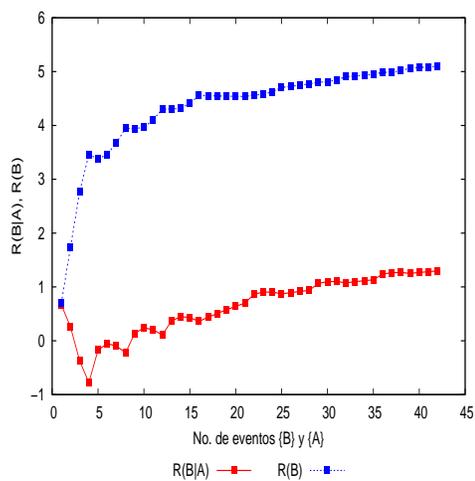
Un aspecto interesante es que podemos definir un límite entre la información separable y la no separable, teniendo como punto de referencia la entropía conjunta $R(B, A)$ ó $H(B, A)$ ⁷ ya que: $R(B : A) > R(B, A) > H(B : A)$, y finalmente, en los sistemas químicos empleados, se puede observar que tales sistemas pueden no estar correlacionados clásicamente, pero si estarlo cuánticamente.

Las tendencias del segundo caso de nuestro modelo (cuando el subsistema $\{B\}$ tiene una dimensión fija y se definen $i = M - 2$ subsistemas $\{A\}_{i=j+2; j=0,1,2,\dots,M}$) se muestran en las Figuras (6.3) y (6.4). Al examinar las Figuras (6.3a) y (6.3b) notamos que desde el primer punto $R(B | A) < R(B)$ y $R(A | B) < R(A)$, y además; $|R(B) - R(B | A)| \sim \text{cte.}$ y $|R(A) - R(A | B)| \sim \text{cte.}$ y también, $|R(A : B) - [R(A) + R(B)]| \sim \text{cte.}$ durante todo el proceso, esto implica que los subsistemas *nunca* dejan de estar correlacionados, además se complementa con la negatividad de $R(B | A)$. Mientras que las entropías tipo H , en el punto inicial $H(B | A) \equiv H(B)$, $H(A | B) \equiv H(A)$ y $R(A, B) \neq R(A) + R(B)$ lo que implica que los subsistemas son informacionalmente separables.

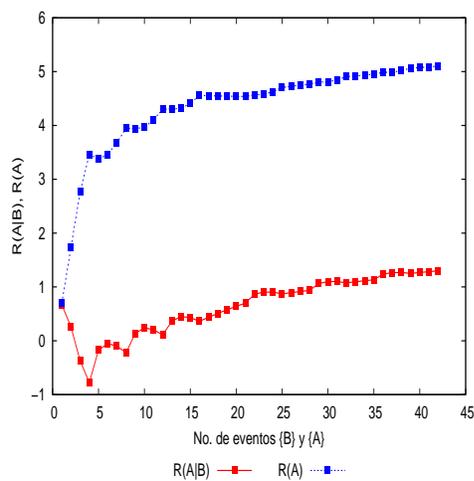
Dado que hemos propuesto que las entropías tipo R pueden detectar el comportamiento cuántico de la información, por lo tanto es necesario que dichas entropías cumplan las condiciones propuestas por Vedral [116]:

1. El entrelazado es cero si y sólo si el estado es separable. Véanse las Figuras (6.1a), (6.1b) y (6.1c). En las cuales en el punto inicial $R(B | A) = R(B)$, $R(A | B) = R(A)$ y $R(A : B) = R(A) + R(B)$, por ello en este caso se dice que el entrelazado es aditivo.
2. El entrelazado no cambia bajo ningún tipo de transformación unitaria del vector de estado. Una evidencia del cumplimiento de esta situación se puede observar al comparar la información mutua condicional $R(A : B)$, con el incremento del número de electrones del subsistema $\{B\}$, Figura (6.7) en donde se nota que la información se incrementa de manera constante en los orbitales p_x, p_y y p_z los cuales son invariantes rotacionalmente.
3. Las operaciones locales no incrementan el entrelazado de los sistemas. En nuestro caso, consideramos el estado Γ^{AB} , el cual fue reducido para obtener $\text{Tr}\Gamma^{AB}$, por tanto al efectuar una transformación local sobre el estado $\text{Tr}\Gamma^{AB}$ el entrelazado no se incrementa, es decir: $E(U_A U_B \Gamma^{AB} U_A^\dagger U_B^\dagger) = E\Gamma^{AB}$.
4. El entrelazado no puede ser creado a partir de operaciones locales. En la Química Moderna, actualmente, ningún esquema de tipo AIM permite medir el entrelazado, para ello es necesario definir una transformación global.

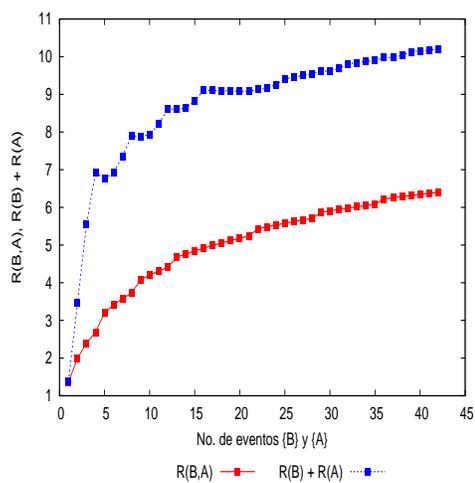
⁷Téngase en cuenta que $R(B, A) \equiv H(B, A)$.



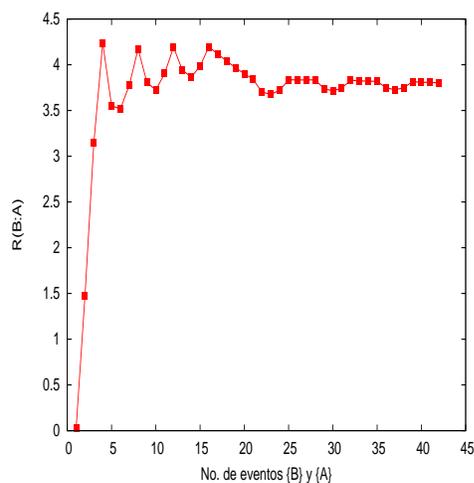
(a) $R(B | A) < R(B)$.



(b) $R(A | B) < R(A)$.

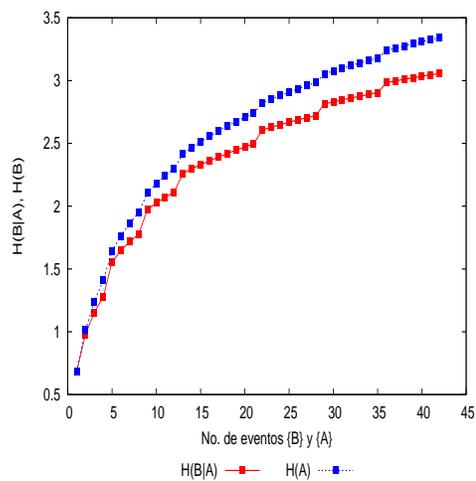


(c) $R(B, A) < R(B) + R(A)$.

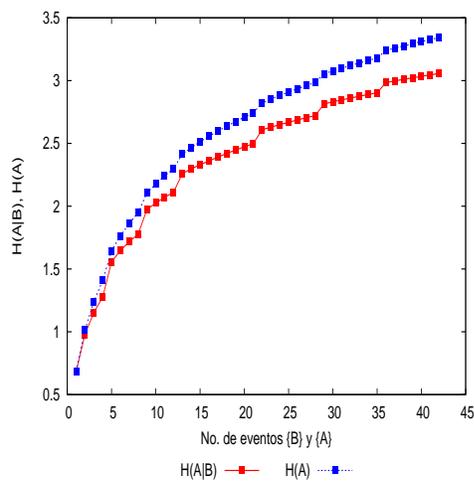


(d) $R(B : A) > 0$.

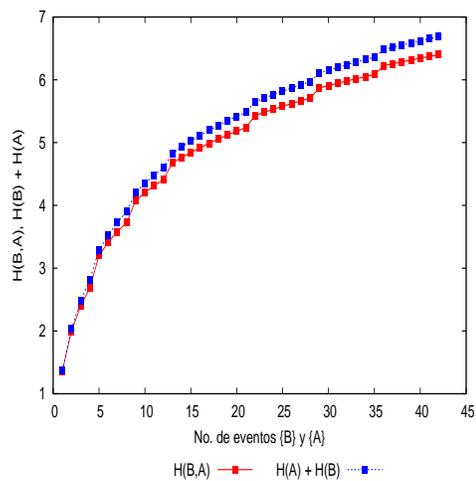
Figura 6.1: Corroboración numérica de las entropías tipo R , para el CH_3CH_3 en donde los conjuntos $\{P_i(B)\}$ y $\{P_i(A)\}$ se incrementan simultáneamente.



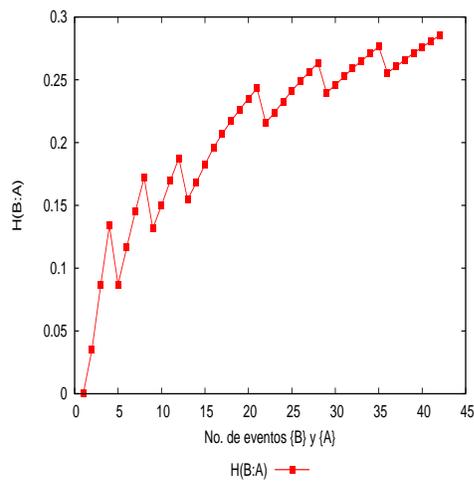
(a) $H(B | A) < H(B)$.



(b) $H(A | B) < H(A)$.

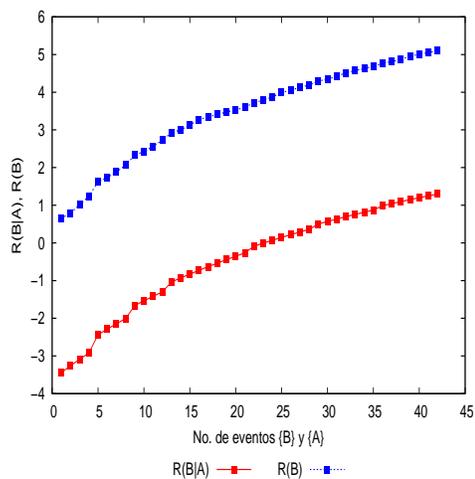


(c) $H(B, A) < H(B) + H(A)$.

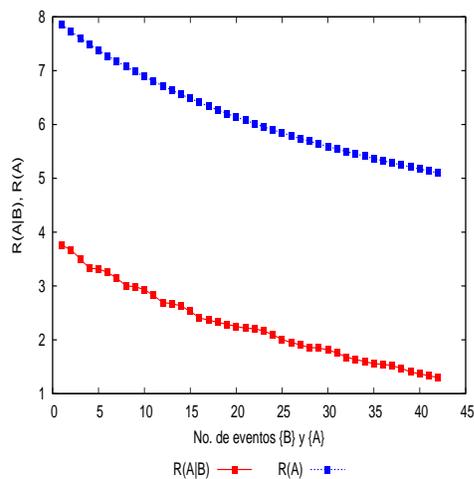


(d) $H(B : A) > 0$.

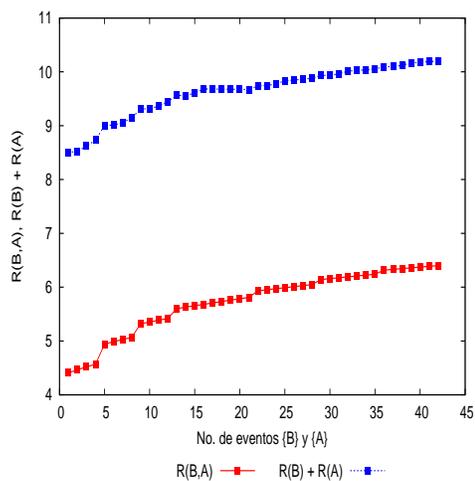
Figura 6.2: Corroboración numérica de las entropías tipo H , para el CH_3CH_3 en donde los conjuntos $\{P_i(B)\}$ y $\{P_i(A)\}$ se incrementan simultáneamente.



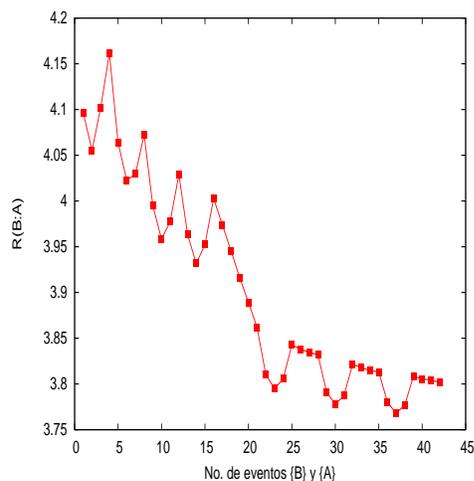
(a) $R(B | A) < R(B)$.



(b) $R(A | B) < R(A)$.

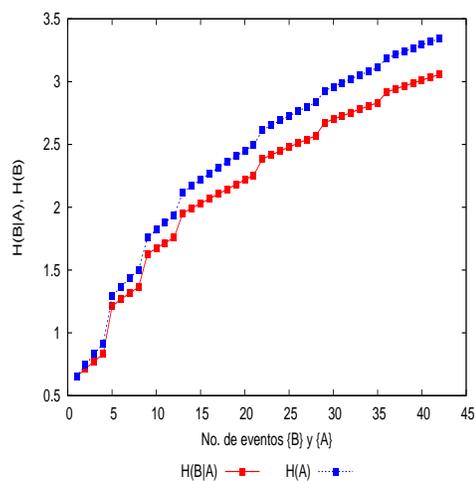


(c) $R(B, A) < R(B) + R(A)$.

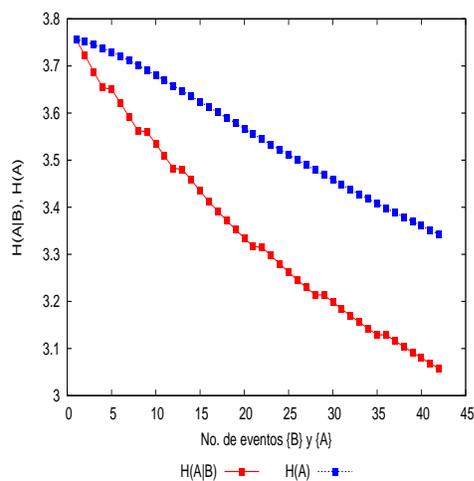


(d) $R(B : A) > 0$.

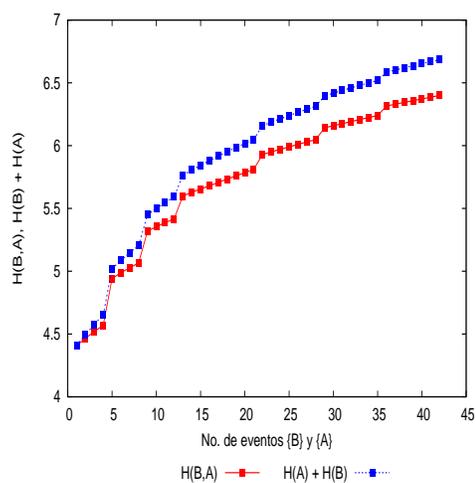
Figura 6.3: Corroboración numérica de las entropías tipo R , para el CH_3CH_3 , en donde $\{P_i(B)\}$ permanece fijo y $\{P_i(A)\}$ se incrementa.



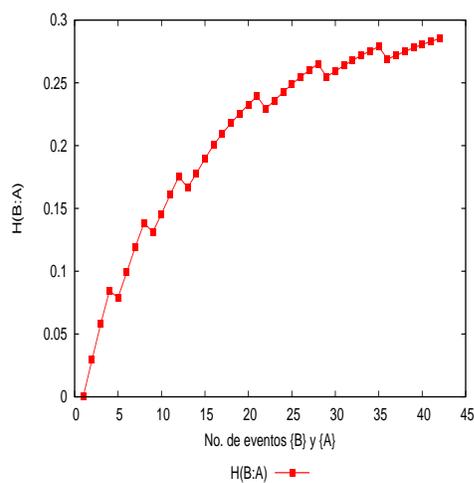
(a) $H(B | A) < H(B)$.



(b) $H(A | B) < H(A)$.



(c) $H(B, A) < H(B) + H(A)$.



(d) $H(B : A) > 0$.

Figura 6.4: Corroboración numérica de las entropías tipo H , para el CH_3CH_3 en donde $\{P_i(B)\}$ permanece fijo y $\{P_i(A)\}$ se incrementa.

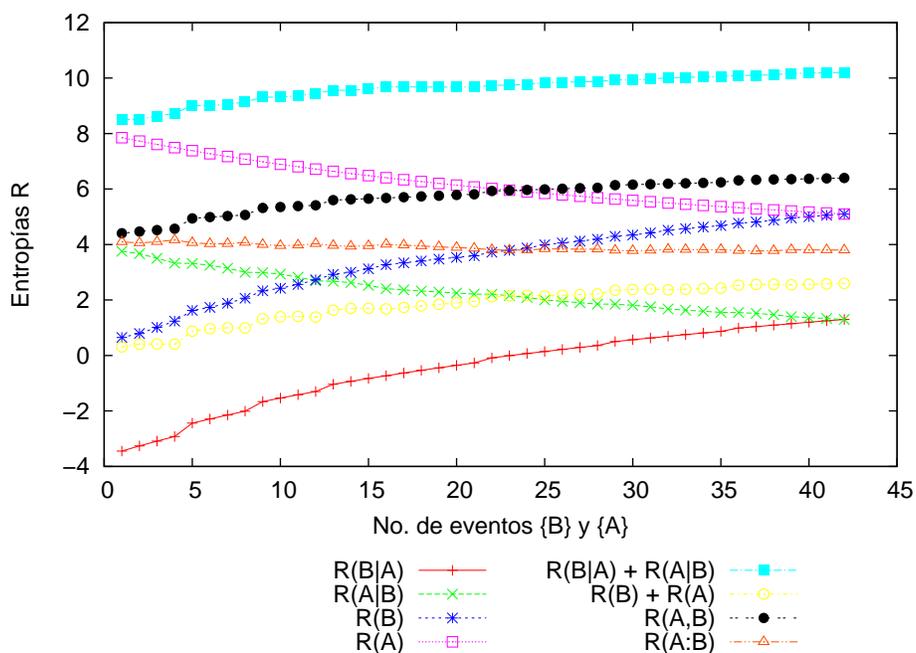


Figura 6.5: Comportamiento de todas las entropías informacionales tipo R , cuando $\{P_i(B)\}$ se mantiene fijo y $\{P_i(A)\}$ se incrementa, del sistema CH_3CH_3 .

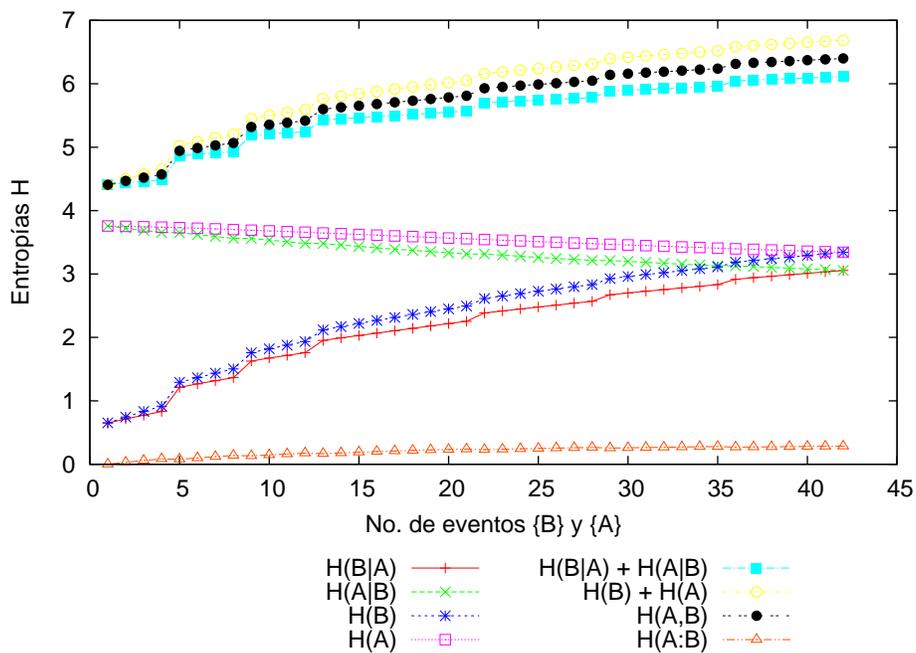


Figura 6.6: Comportamiento de todas las entropías informacionales tipo H , cuando $\{P_i(B)\}$ se mantiene fijo y $\{P_i(A)\}$ se incrementa, del sistema CH_3CH_3 .

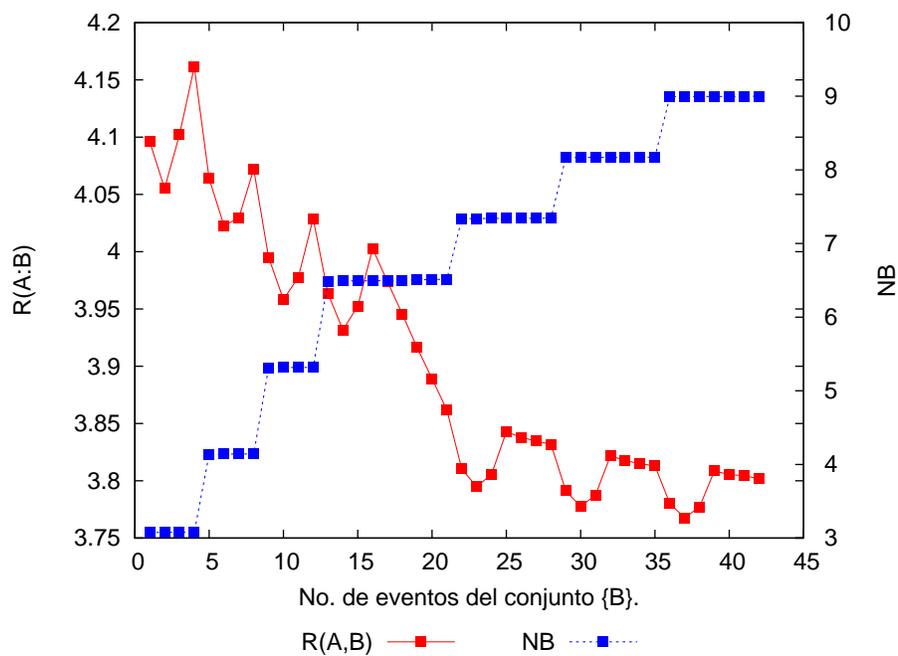


Figura 6.7: Comparación de la información mutua tipo R con el número de electrones del subsistema $\{P_i(B)\}$

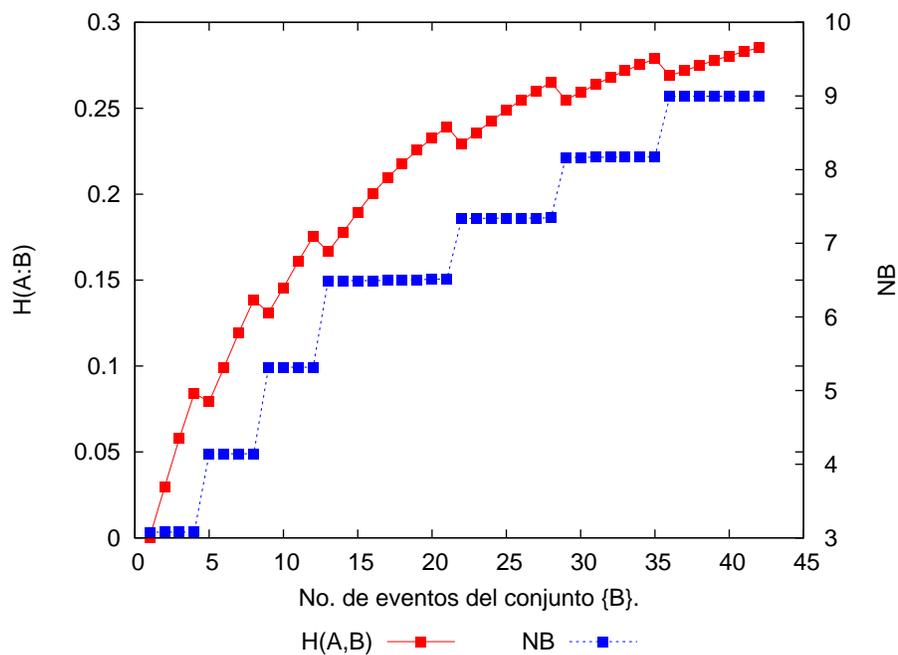


Figura 6.8: Comparación de la información mutua tipo H con el número de electrones del subsistema $\{P_i(B)\}$

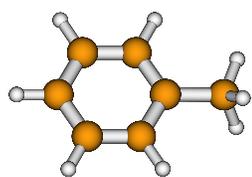
Capítulo 7

Caracterización de sistemas químicos

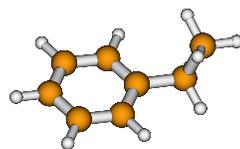
En este capítulo, se mostrará que algunos de los conceptos químicos habituales, como, interacciones intermoleculares, dureza y blandura, pueden relacionarse con conceptos generales de la Teoría Cuántica de la información, que en última instancia son las medidas más generales de correlación.

7.1. Correlación química: Entrelazado atómico

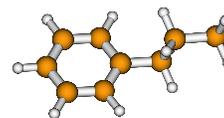
Con los presentes ejemplos, mostraremos que el entrelazado puede ser empleado para caracterizar los sistemas químicos. Los sistemas seleccionados se muestran en la Figura (7.1) y fueron calculados con Gaussian 03 [37] empleando los métodos: HF, B3LYP, BLYP, PBE, CIS, CISD, MP2, MP3 y la base 6-31G. Las probabilidades atómicas naturales fueron calculadas con NBO 5.0 [40].



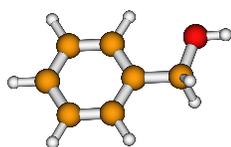
(a) R1



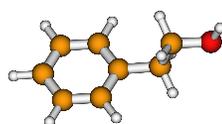
(b) R2



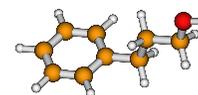
(c) R3



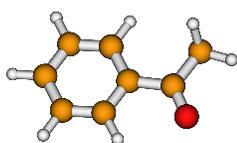
(d) OH1



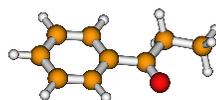
(e) OH2



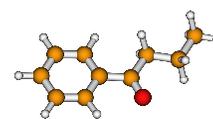
(f) OH3



(g) C1



(h) C2



(i) C3

Figura 7.1: Bencenos sustituidos y la nomenclatura empleada

En la Figura (7.2) se presentan las tendencias de la información conjunta, (de la cual se mostró que: $H(A, B) \equiv R(A, B)$). A partir de la cual se desprenden las siguientes conclusiones:

1. El entrelazado es único y característico para cada especie química.
2. El entrelazado es independiente de los aspectos reduccionistas de las metodologías y no puede ser incrementado o disminuido por las transformaciones locales de las mismas.
3. Esta medida informacional ($H(A, B)$ o $R(A, B)$) nos muestra que las interacciones cuánticas de estos sistemas pueden considerarse independientes de los métodos puesto que dichas interacciones se dan a nivel de la función de onda.

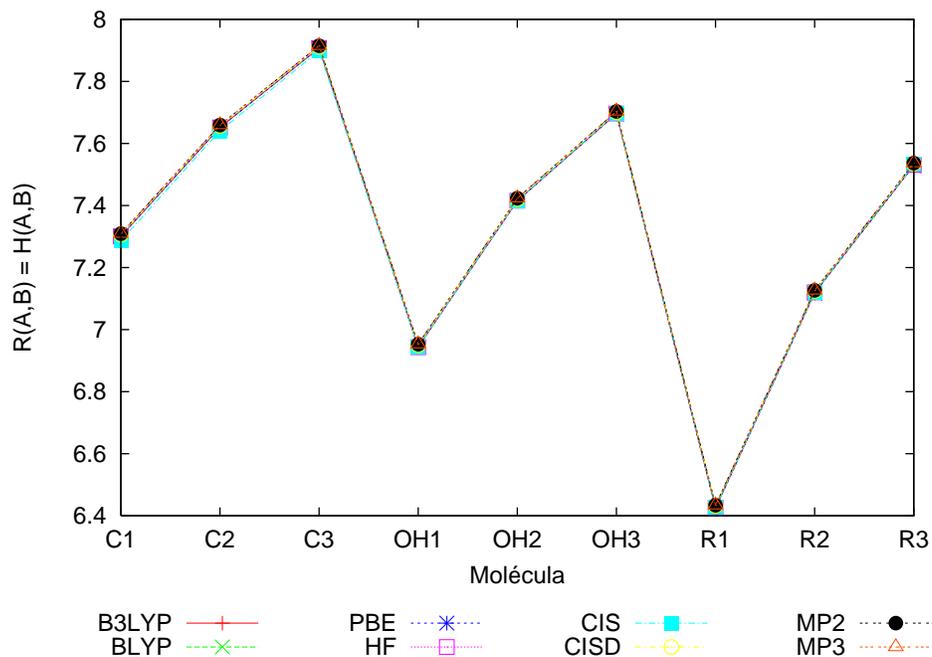


Figura 7.2: Comparación de la medida de entrelazado empleando diferentes métodos.

7.2. Las medidas de entrelazado y su relación con la dureza y la blandura

Uno de los aspectos más importantes en la Química, es el estudio de los diferentes arreglos que puede tener una molécula obtenidos por la rotación, alrededor de un enlace sencillo. Tales arreglos se denominan conformeros.

Así, para propósitos de nuestro trabajo seleccionamos el fluoroetano como sistema de estudio, el cual se calculó con B3LYP/6-31G con Gaussian 03. El estudio consistió en una rotación del fluorometilo, con un intervalo de 10 grados, partiendo desde 0 hasta 180 grados, como se muestra en la Figura (7.3). En todos los cálculos de las entropías de von Neumann, se seleccionó el subsistema $\{B\} = CH_2F$ y el subsistema $\{A\} = CH_3$.

Aunque en principio existe un número infinito de conformaciones debidas a la rotación en torno a la unión carbono-carbono de este sistema. En 1936, J. D. Kemp y K. S. Pitzer [55] demostraron que la rotación para este tipo de sistemas no es libre, sino que existe una barrera energética. En este caso, esta barrera resulta del eclipsamiento entre átomos de cada metilo y se le denomina como energía de torsión o tensión de Pitzer.

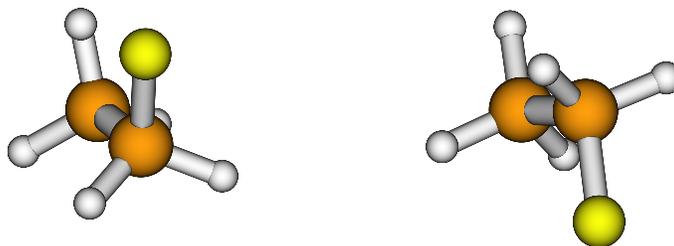


Figura 7.3: Representación de los ángulos inicial y final del análisis conformacional del fluoroetano.

Las tendencias de las entropías informacionales, se compararon con la dureza, la energía de torsión y la energía de correlación. La dureza se calculó como:

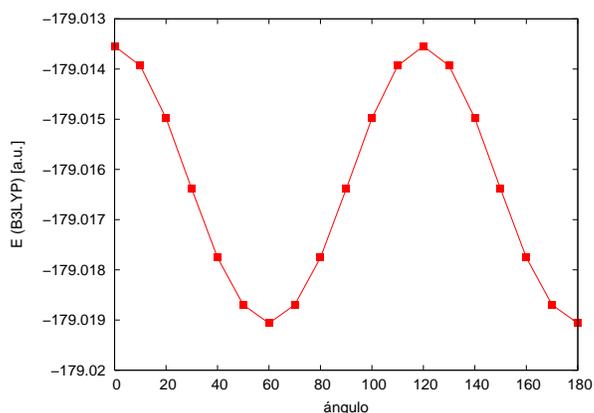
$$\eta = \frac{E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}}{2}.$$

En la Figura (7.4(a)) se muestra la tendencia de la energía de torsión, en la Figura (7.4(b)) se muestra la comparación de la entropía $R(A : B)$ con la blandura, en la Figura (7.4(c)) se muestra la comparación de la información no común tipo R con la dureza. En la Figura (7.4(d)) se muestra la comparación de la entropía $H(A : B)$ con la dureza y finalmente en la Figura (7.4(e)) se muestra la comparación de la información no común tipo H con la blandura.

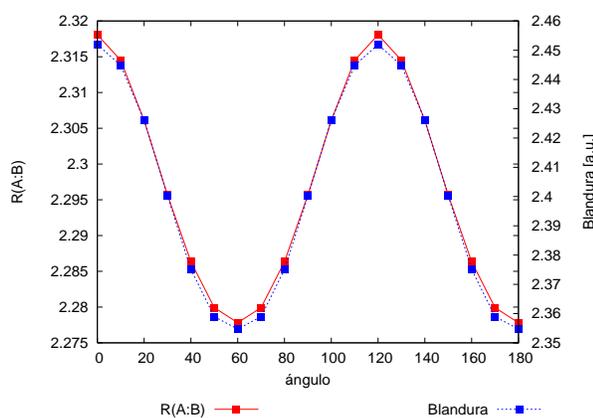
En este caso, ambos tipos de entropías informacionales obedecen las cotas de la teoría clásica de la información. Sin embargo hay un comportamiento equivalente a la relación dureza-blandura, en términos de las entropías, concretamente la información no común (que es la suma de las entropías condicionales) y la información mutua condicional. Esto es mientras que la

información mutua condicional es la información que los subsistemas comparten, la información no común es la información que esta sin compartir.

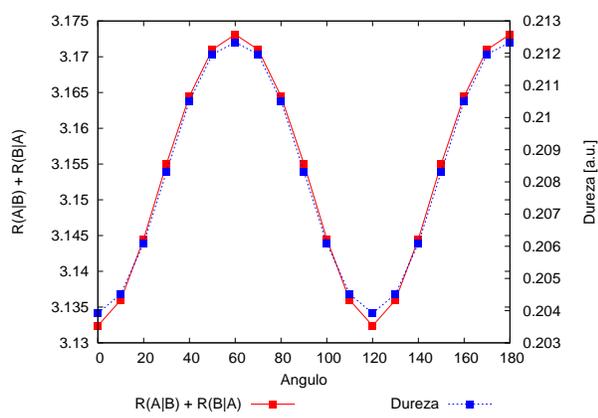
Con ello, hemos mostrado que se puede establecer una equivalencia entre el comportamiento de las entropías informacionales y la dureza y la blandura. Dentro de un marco general de los conceptos, la dureza está relacionada a sistemas químicos compactos y la blandura a los sistemas dispersos y por tanto puede estar relacionada con la polarizabilidad de los sistemas [119], entonces es natural que la dureza esté vinculada a la medida para compartir la información (información mutua condicional) entre sistemas y la blandura con la factibilidad de los sistemas a transferir información.



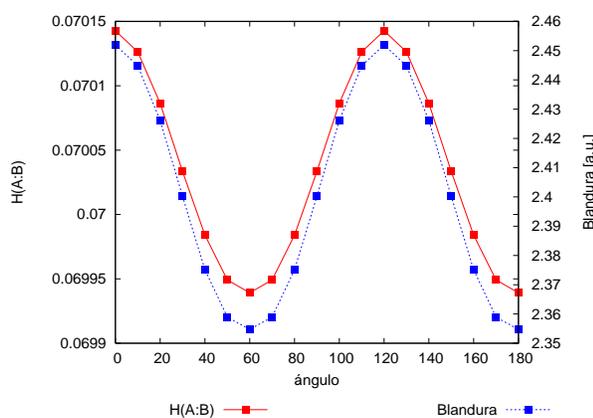
(a) Perfil de la energía de torsión del fluoroetano.



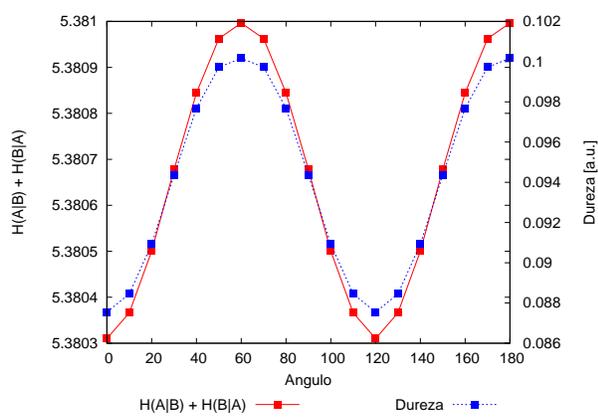
(b) $R(A : B)$ vs blandura.



(c) $R(A | B) + R(B | A)$ vs dureza.



(d) $H(A : B)$ vs blandura.



(e) $H(A | B) + H(B | A)$ vs dureza.

Figura 7.4: Comparación de las tendencias de la información mutua y la información no común con la dureza y la blandura.

Capítulo 8

Caracterización de procesos químicos

Una de las ventajas de emplear las entropías informacionales descritas en este trabajo, es que pueden hacer notar la mayor parte de los puntos críticos del proceso en los que ocurren cambios físicos importantes, tales como acumulaciones o remociones de carga, atractores no nucleares, rupturas de enlaces, entre otros. Estos cambios pueden sólo ser determinados haciendo un estudio en el que se empleen algunos descriptores de la densidad electrónica tal como el laplaciano de la densidad electrónica y el potencial electrostático molecular. En los siguientes ejemplos se muestra que con las entropías tipo H y tipo R se pueden poner de manifiesto este tipo de información de los procesos y se muestra que tales entropías pueden detectar las correlaciones de tipo clásico y las de tipo cuántico.

Gran parte de los estudios que nos han permitido caracterizar las entropías informacionales tipo R como las tipo H , han sido algunos procesos químicos simples, como las siguientes disociaciones: Cl_2 , HCl y Na_2 . Las cuales fueron calculadas con Gaussian 03 [37], empleando B3LYP/6-31G. En el caso de las disociaciones homonucleares, se indujo la ruptura de simetría de espín. En todos los casos, se compararon los puntos críticos tanto de las entropías tipo R como las tipo H , con la energía total de sistema, la dureza, la blandura y las cargas. Asimismo, se obtuvieron las isosuperficies del potencial electrostático molecular (MEP) y del laplaciano de la densidad (LAP) con el programa MOLDEN 4.4 [105] de los puntos críticos de las tendencias de las entropías informacionales, las probabilidades atómicas naturales fueron calculadas con NBO 5.0 [40].

8.1. Disociación del Cl_2

Para la caracterización de este proceso químico se emplearon las entropías tipo R (Figuras 8.3(a)–8.3(d)) y tipo H (Figuras (8.1(b)–8.1(e)). En la Figura (8.1(a)) se muestra la tendencia de la energía total del sistema, y la distancia internuclear de equilibrio es de 2.2037 Å.

En la Figura (8.1(b)), se muestra el comportamiento de las entropías condicionales tipo H y en la Figura (8.2) se muestran las isosuperficies del laplaciano de la densidad y del potencial electrostático molecular.

Las entropías condicionales tipo H presentan un máximo en 0.3 Å, ocasionado por una repulsión de cargas esto tiene como consecuencia una dispersión de la densidad de los átomos de cloro. Mientras que el máximo de las entropías condicionales que se encuentran en 1.1 Å, corresponde a un punto en el que los átomos de cloro comienzan un proceso de estabilización de las cargas de los átomos hasta alcanzar la distancia internuclear de equilibrio. A una distancia internuclear de 2.7 Å, en donde se observa un mínimo que está asociado a la separación de los átomos de cloro. Posteriormente, se observa un incremento de las entropías condicionales, para después estabilizarse en 3.7 Å, lo cual se atribuye a la estabilización de los átomos de cloro disociados.

En el caso de las entropías de los subsistemas, $H(A)$ y $H(B)$, ambas presentan los mismos puntos críticos que las entropías condicionales (en este caso). Mientras que la información mutua condicional $H(A : B)$ tiene un comportamiento especular a la entropía conjunta $H(A, B)$, véase las Figuras (8.1(d)) y (8.1(e)). El comportamiento de las entropías se lista a continuación:

1. $H(A | B) < H(A)$.
2. $H(B | A) < H(B)$.
3. $H(A : B) < H(A, B)$.
4. $H(A | B) > 0$.
5. $H(B | A) > 0$.
6. $H(A) + H(B) < H(A, B)$.
7. $H(A | B) + H(B | A) > H(A : B)$.

Las entropías condicionales tipo R que se muestran en la Figura (8.3(a)) presentan una zona acotada por un máximo en 1.1 y un mínimo en 2.7 Å respectivamente, esta zona corresponde a un proceso de estabilización de los átomos de cloro, pasando por la distancia internuclear de equilibrio, en este proceso las entropías condicionales y de los subsistemas (tipo H y las tipo R) poseen prácticamente la misma estructura, estas últimas presentan un comportamiento especular con respecto a las entropías condicionales, mientras que en el caso de la información mutua condicional no se mantiene tal relación. Al comparar todas las tendencias de las entropías tipo R , Figura (8.4), encontramos las siguientes igualdades:

1. En 1.9 Å, tenemos que $R(A | B) \equiv R(B | A) \equiv R(A : B)$ y $R(A | B) + R(B | A) \equiv R(B) \equiv R(A)$.
2. En 2.4, 2.9 y en 3.9 Å, tenemos que $R(A | B) + R(B | A) \equiv R(A : B)$.

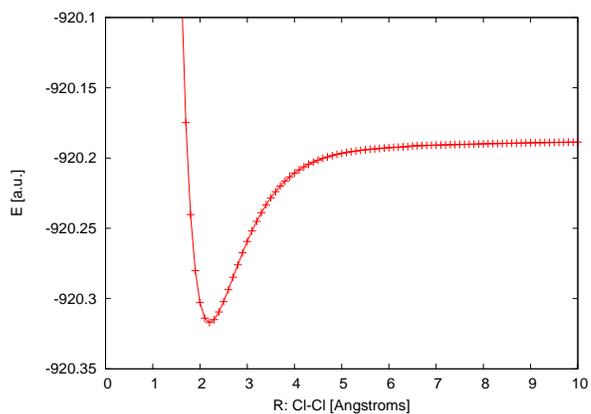
Estas igualdades nos indican que el sistema está totalmente correlacionado aún a distancias mayores que la de equilibrio¹, generalizando este resultado, se puede entonces concluir que no importa la distancia que separe los subsistemas éstos siempre estarán correlacionados.

La información mutua, a una distancia internuclear mayor de 4.0 Å, es mayor que la información no común, $R(A : B) > R(A | B) + R(B | A)$, lo cual implica que la información que los sistemas comparten cuando están disociados es mayor que la información que dichos sistemas pueden compartir enlazados mediante un enlace químico. Analizando esto con el debido cuidado, encontramos dos aspectos importantes:

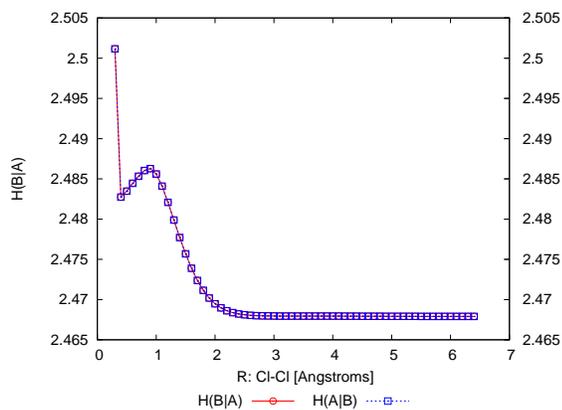
- i) La información total del sistema permanece constante durante todo el proceso.
- ii) A medida que el sistema se separa las interacciones clásicas disminuyen y las interacciones cuánticas se hacen mas evidentes.

Esto ha sido catalogado como un comportamiento cuántico de la información [23, 24, 100]. En los ejemplos siguientes se muestra que este comportamiento de la información se complementa con la negatividad de la entropía condicional, la cual, dentro de este contexto, puede ser empleada como una característica distintiva del entrelazado de un sistema químico en el que se está efectuando un proceso.

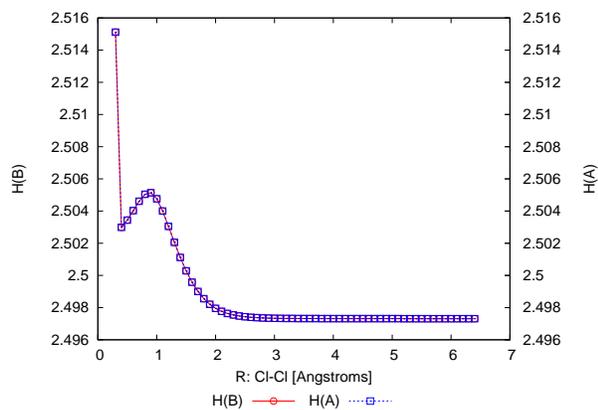
¹La distancia internuclear de equilibrio de este sistema es de 2.2037 Å, mientras que el radio de van der Waals para el átomo de cloro esta dentro de un intervalo de 1.7–1.9 Å [18].



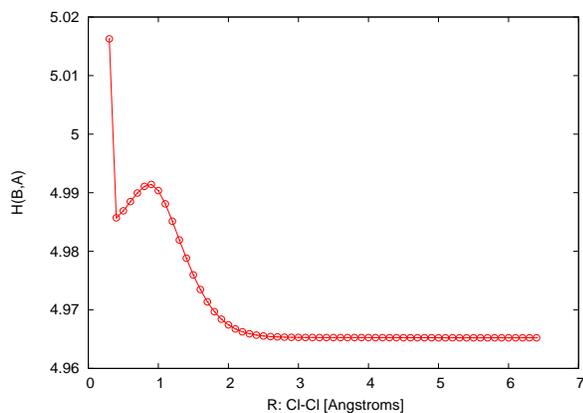
(a) Energía total.



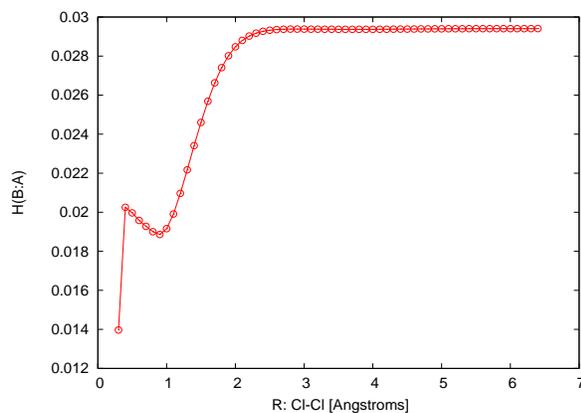
(b) Entropías condicionales.



(c) Entropías de los subsistemas.



(d) Entropía conjunta.



(e) Información mutua.

Figura 8.1: Tendencia de la energía total y de las entropías tipo H del proceso de disociación del Cl_2 .

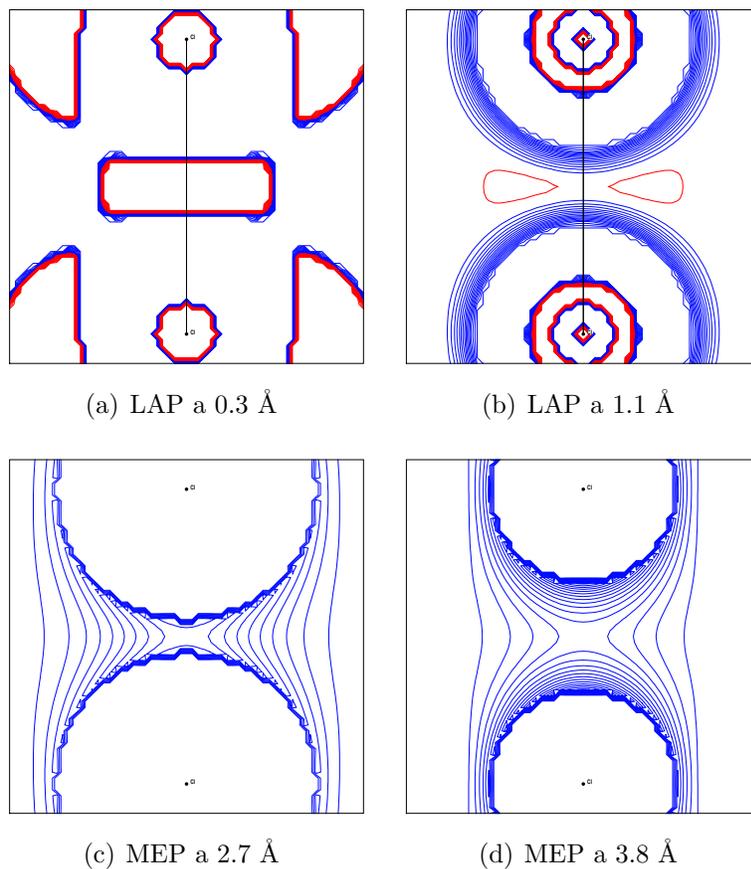
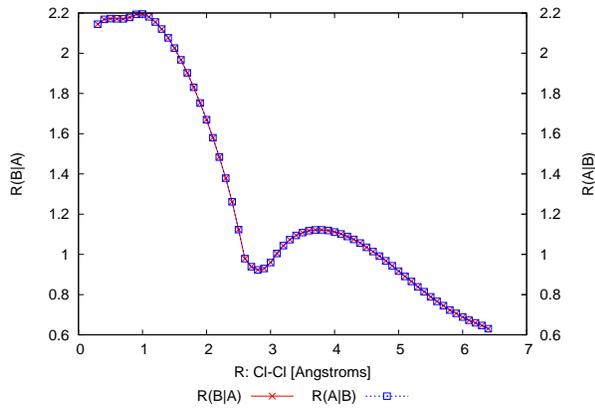
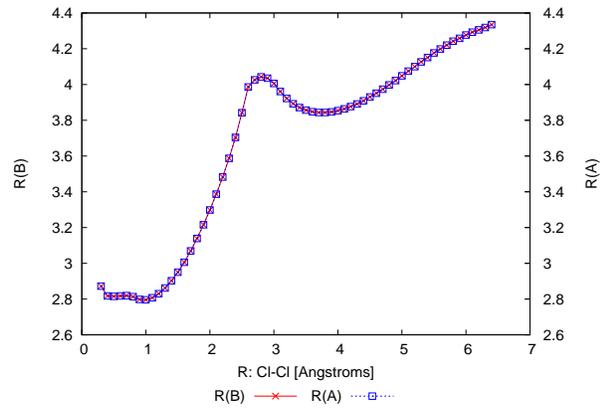


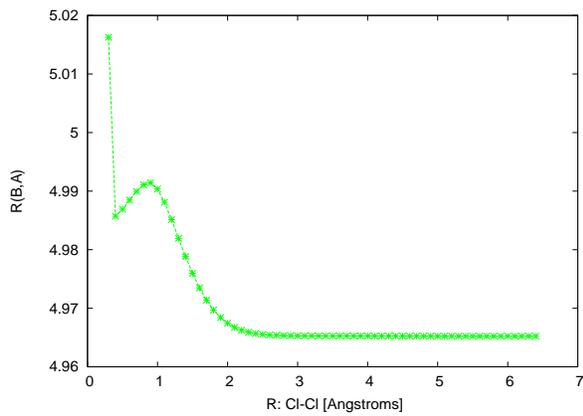
Figura 8.2: Isosuperficies del laplaciano de la densidad electrónica (LAP) y del Potencial electrostático molecular (MEP) del Cl_2 a diferentes distancias internucleares que corresponden a los diferentes puntos críticos de las tendencias de las entropías informacionales mostradas en la Figura (8.1).



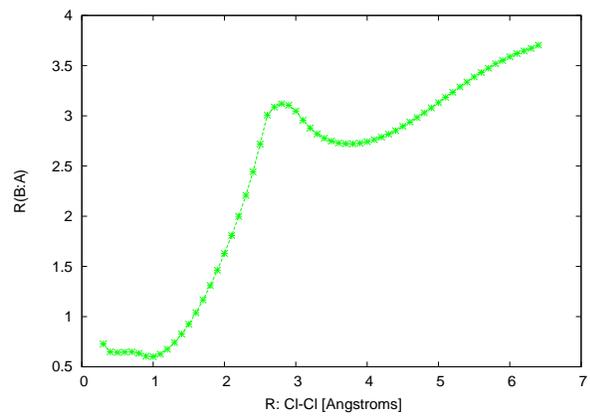
(a) Entropías condicionales.



(b) Entropías de los subsistemas.



(c) Entropía conjunta.



(d) Información mutua.

Figura 8.3: Tendencias de las entropías tipo R del proceso de disociación del Cl_2 .

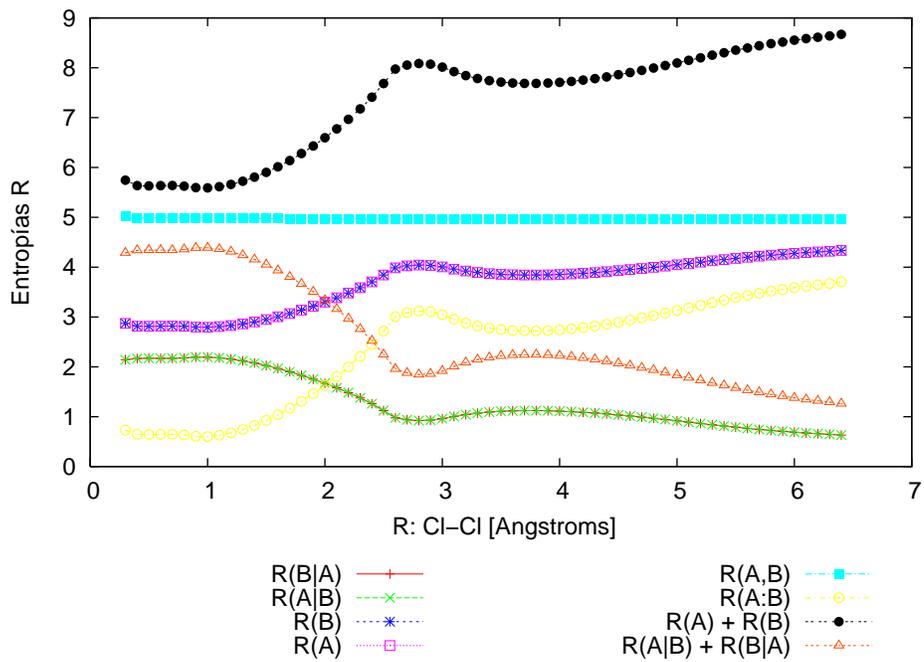


Figura 8.4: Comportamiento de todas las entropías informativas tipo R en el proceso de disociación del Cl_2 .

8.2. Disociación del HCl

Los resultados se presentan en el siguiente orden. En la Figura (8.5(a)), se muestra el perfil de la energía total del sistema, en las Figuras (8.5(b)–8.5(e)) se muestran las tendencias de las entropías informacionales tipo H , en las Figuras (8.7(c)–8.7(f)) se muestran las tendencias de las entropías tipo R y en las Figuras (8.6) se muestran algunas isosuperficies del potencial electrostático molecular y del laplaciano de la densidad. Para este sistema la distancia internuclear de equilibrio es de 1.32003 \AA , la energía a esta distancia es de -460.77627 a.u.

En el caso de las entropías condicionales tipo H , Figura (8.5(b)), presentan un máximo en 0.9 \AA , que corresponde al comienzo de la separación de las densidades de carga de los átomos en cuestión lo cual se comprueba con las isosuperficies del laplaciano de la densidad (8.6), este proceso de estabilización está caracterizado (entrópicamente) por tres puntos de inflexión en 1.5 , 2.0 y 2.5 \AA , los cuales están vinculados al proceso de disociación que se está llevando a cabo lo cual se puede observar mediante las isosuperficies del laplaciano de la densidad y del potencial electrostático molecular de los puntos críticos mostradas en la Figura (8.6). Al igual que el caso anterior, la estructura de la tendencia de la información total del sistema, $H(A, B)$, mantiene una relación de tipo especular con la información que los subsistemas comparten, $H(A : B)$, ver las figuras (8.5(d)) y (8.5(e)).

Al tratar sistemas heteronucleares encontramos mediante un análisis visual un comportamiento general de las entropías condicionales tipo H con respecto a las entropías de los subsistemas las cuales se muestran en las Figuras (8.7(a)) y (8.7(b)) en donde $H(A | B)$ y $H(A)$ presentan básicamente la misma estructura y de igual manera $H(B | A)$ con $H(B)$. Por ello, es posible establecer que para las entropías tipo H , el comportamiento del conjunto $\{B\}$ determinará el comportamiento general de $H(B | A)$ y el conjunto $\{A\}$ determinará el comportamiento de $H(A | B)$. En este caso las tendencias de las entropías condicionales describen de la misma forma el proceso de disociación.

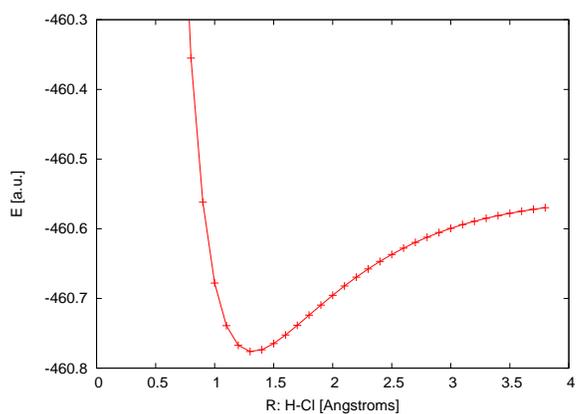
Las tendencias de las entropías tipo R se muestran en las Figuras (8.7(c)–8.7(f)). En la Figura (8.7(c)) se muestran las tendencias de las entropías condicionales, en la Figura (8.7(d)) se muestran las entropías de los subsistemas, en las Figuras (8.7(e)) y (8.7(f)) se muestra el comportamiento de la entropía conjunta y la información mutua, respectivamente y finalmente en la Figura (8.9) se muestra el comportamiento de todas las entropías tipo R .

Como ya se había discutido anteriormente, estas entropías pueden detectar el comportamiento cuántico de la información, en este ejemplo se muestra que $R(B | A) < 0$ donde $\{B\} = H$ y $\{A\} = Cl$, mientras que $R(A | B) > 0$, en general se ha propuesto que la negatividad de las entropías condicionales puede ser un requisito necesario más no suficiente para clasificar este comportamiento como cuántico [1, 23, 90]. La entropía $R(B | A) < 0$, ver la Figura (8.7(c)), y presenta un punto mínimo en 0.5 \AA , que al igual que su homóloga tipo H , dicho mínimo corresponde a una separación de las densidades de los átomos, también presenta un máximo en 0.9 \AA , dos cambios de curvatura en 1.9 \AA , y en 2.2 \AA , un mínimo en 2.4 \AA , y un máximo local en 3.5 \AA , los cuales pueden ser explicados en términos de acumulación y remoción de la densidad electrónica lo cual puede ser apreciado en en la Figura (8.8) donde se muestran las isosuperficies del laplaciano de la densidad correspondientes a las distancias internucleares de 0.5 y 0.9 \AA , asimismo se presentan las isosuperficies del potencial electrostático molecular a las distancias internucleares de 2.2 , 2.4 y 3.5 \AA .

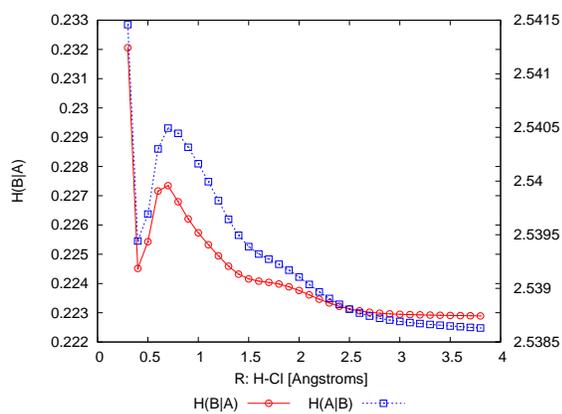
La entropía $R(A | B)$, presenta un mínimo en 0.5 Å, un máximo en 0.7 Å, y dos puntos de inflexión, uno en 1.5 Å, y otro en 2.0 Å, que también están relacionados con los cambios de la densidad electrónica.

A diferencia de las entropías informacionales tipo H , las entropías tipo R , tienen un comportamiento contrario respecto a las entropías de los subsistemas, ya que para $R(B | A)$ es el subsistema $\{A\}$ quien determina el comportamiento general y de $R(A | B)$ es $\{B\}$, ver las Figuras (8.7(c)) y (8.7(d)).

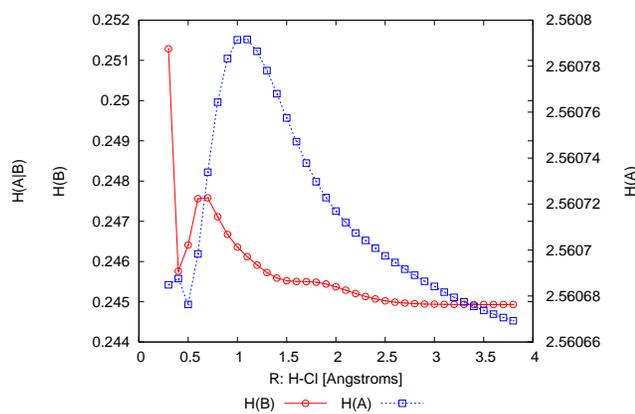
En la Figura (8.9) se hace una comparación de todas las entropías tipo R con la finalidad de establecer y corroborar las cotas establecidas de estas entropías o bien determinar mediante este tipo de comparaciones si existe algún tipo de igualdad numérica entre las diferentes entropías, en dicha Figura se observa que a una distancia internuclear de 1.5 Å, $R(B) = R(A | B) + R(B | A)$ y $R(A | B) = R(A : B)$. Mientras que en intervalo 1.8–1.9 Å, $R(A, B) = R(A : B)$, esta igualdad implica que la información total es igual a la información que los subsistemas comparten, es decir, que ambos subsistemas se encuentran totalmente correlacionados. A partir de 2.0 Å, $R(A : B) > R(A, B)$ que implica que la información compartida por los subsistemas es mayor que la información total del sistema, la cuál es máxima en 2.5 Å, y posteriormente decrece, este puede ser uno de los aspectos más interesantes en este proceso, por un lado tenemos que existen igualdades entrópicas no reportadas en la bibliografía especializada y que han sido obtenidas por primera vez en un proceso químico sencillo, pero sin duda lo más fascinante de este comportamiento es la interpretación física que podemos hacer de la información, por ejemplo, cómo visualizar o entender el comportamiento de un sistema en el que una de las partes que lo constituyen puede tener más información que todo el sistema ($R(A) > R(A, B)$) o bien aunque en el límite del proceso de disociación los sistemas pueden ser considerados (físicamente) como átomos independientes, la información de éstos sistemas sigue estando correlacionada mediante algún tipo de correlación clásicamente desconocida.



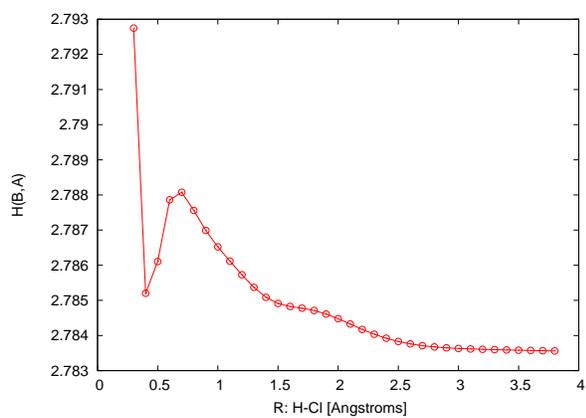
(a) Energía total.



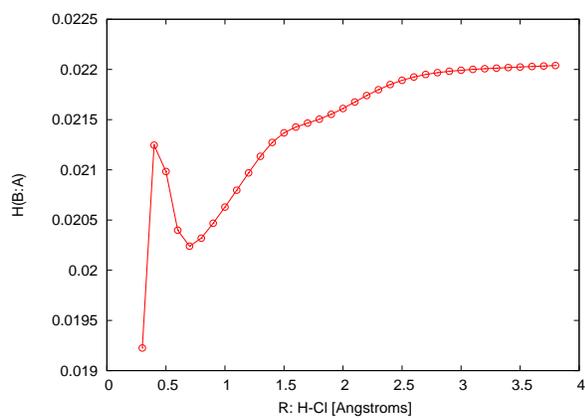
(b) Entropías condicionales.



(c) Entropías de los subsistemas.



(d) Entropía conjunta.



(e) Información mutua.

Figura 8.5: Tendencia de la energía total y de las entropías tipo H del proceso de disociación del HCl .

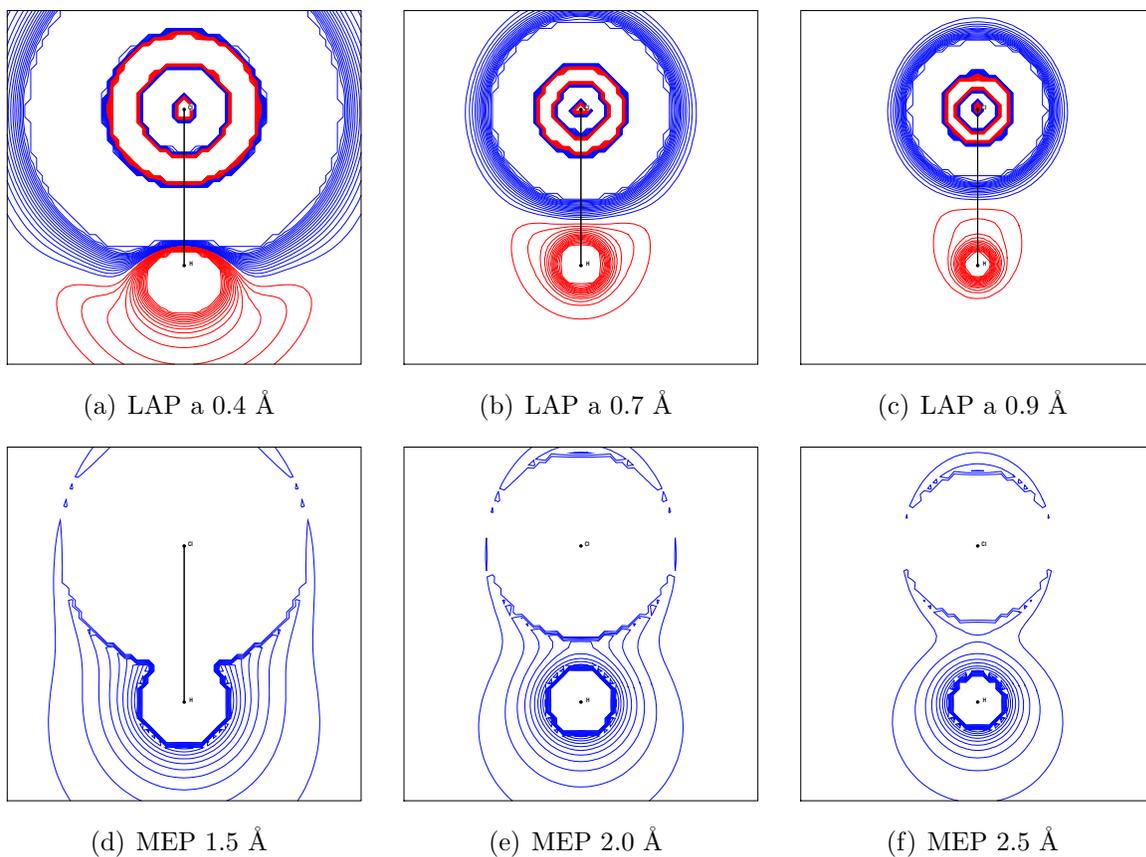
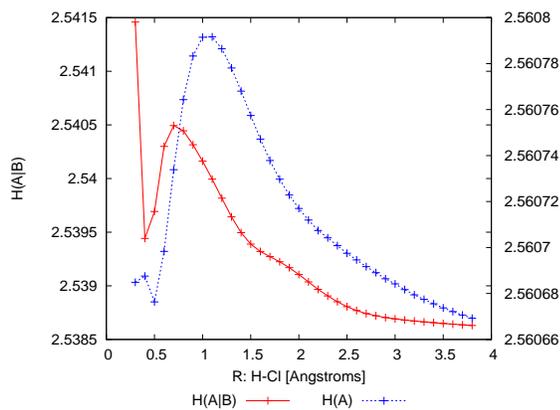
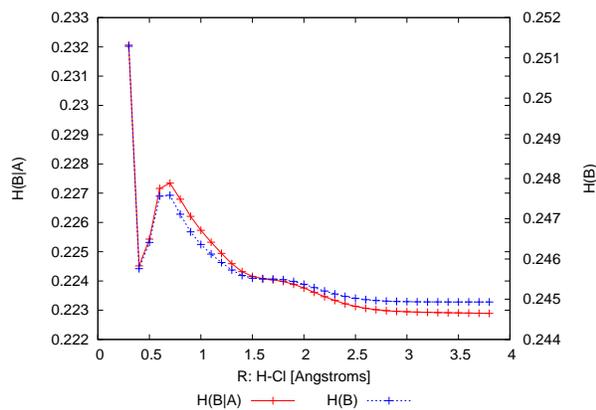


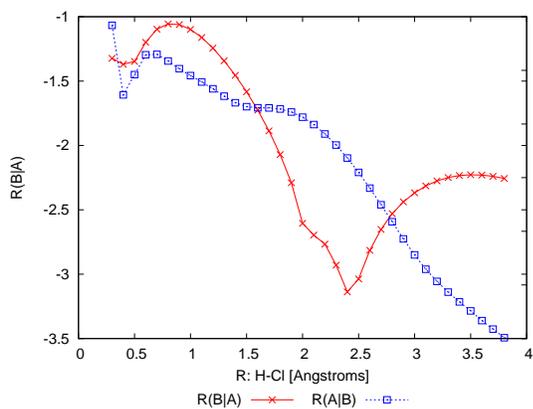
Figura 8.6: Isosuperficies del laplaciano (LAP) y del potencial electrostático molecular (MEP) del HCl que corresponden a los puntos críticos de las entropías tipo H mostradas en la Figura (8.5).



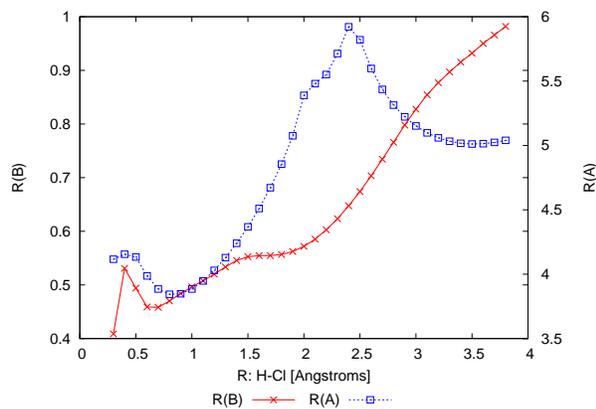
(a) $H(A | B)$ vs $H(A)$.



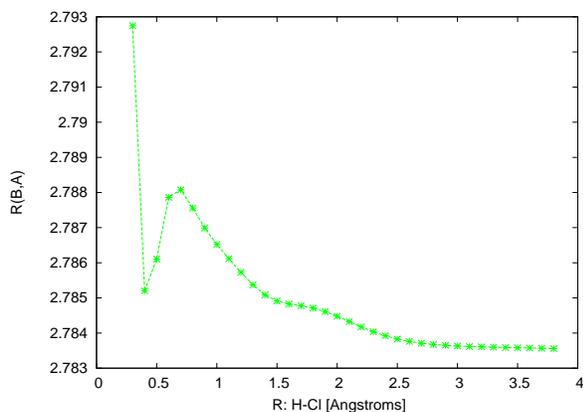
(b) $H(B | A)$ vs $H(B)$.



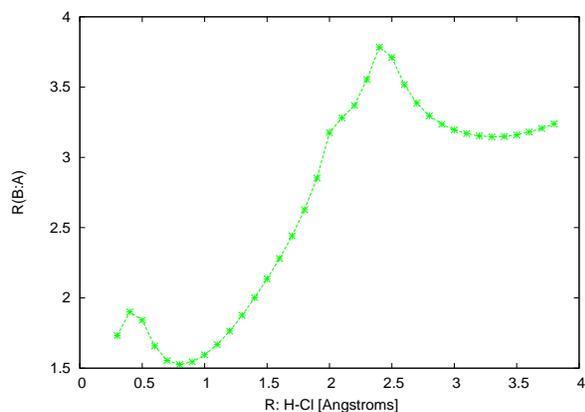
(c) Entropías condicionales.



(d) Entropías de los subsistemas.



(e) Entropía conjunta.



(f) Información mutua.

Figura 8.7: Tendencias de las entropías tipo R del proceso de disociación del HCl .

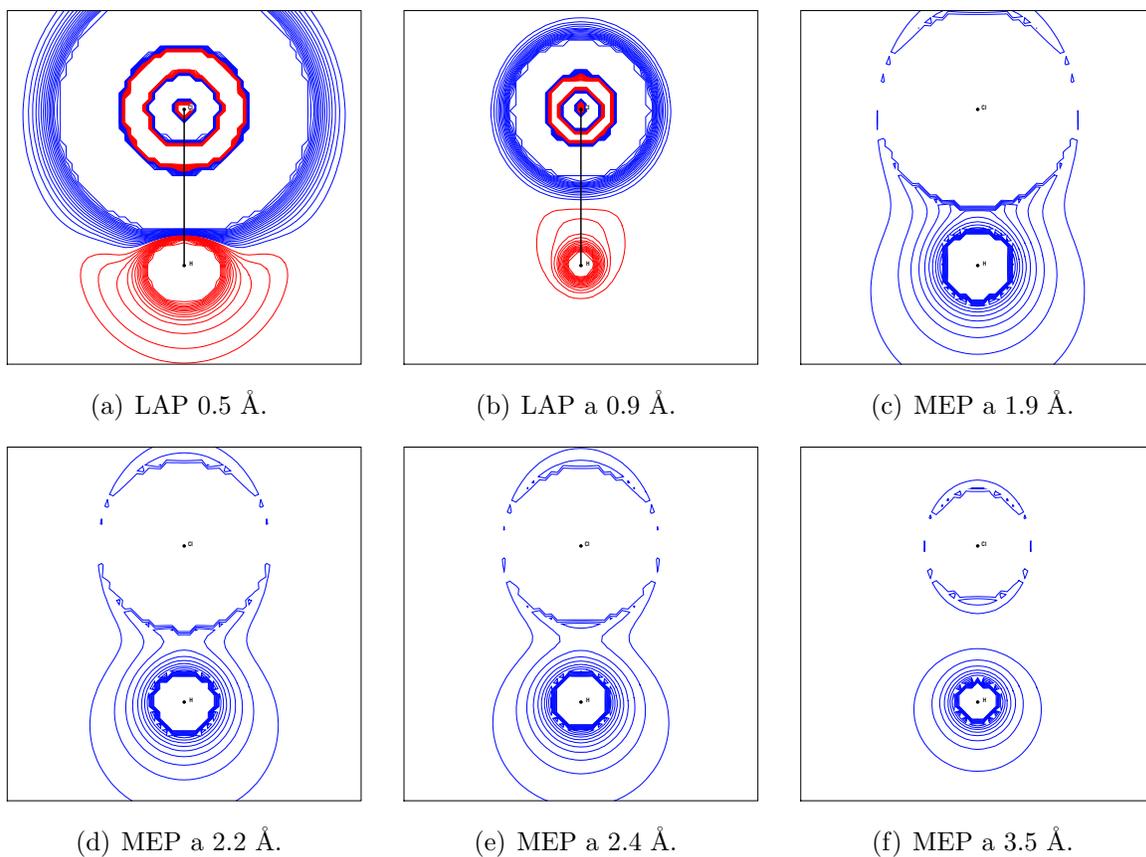


Figura 8.8: Isosuperficies del laplaciano de la densidad (LAP) y del potencial electrostático molecular (MEP) del HCl que corresponden a los puntos críticos observados en las tendencias de las entropías tipo R mostradas en la Figura (8.7).

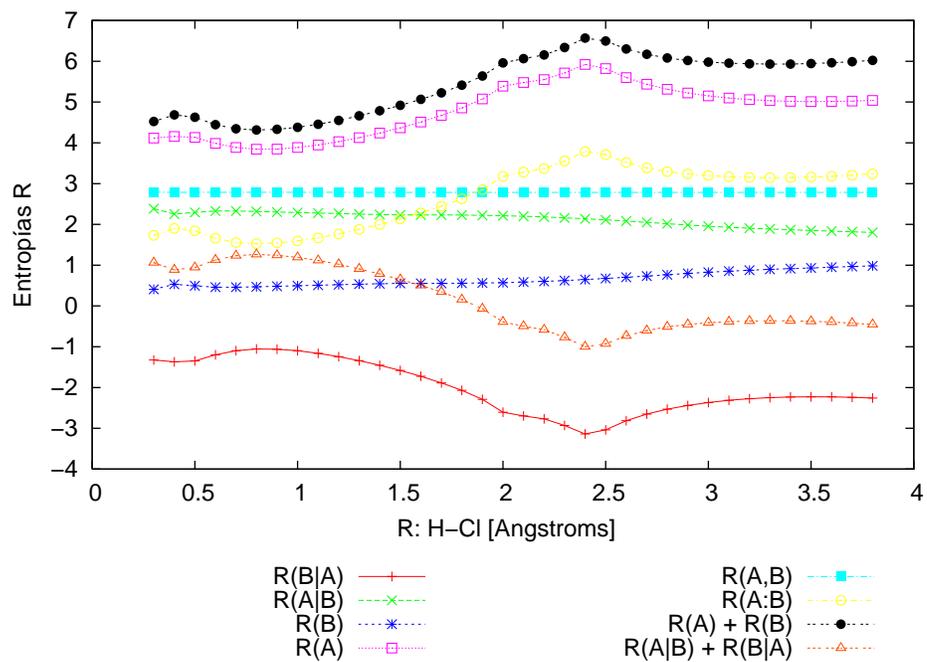


Figura 8.9: Comportamiento de todas las entropías informacionales tipo R en el proceso de disociación del HCl .

8.3. Disociación del Na_2

Uno de los aspectos de considerable importancia, durante el proyecto, fue establecer si dado un sistema homonuclear es posible obtener entropías condicionales tipo R negativas.

Para lo cual se seleccionó el Na_2 por ser un sistema químicamente muy interesante del que se ha reportado la existencia de atractores no nucleares [29], por tal motivo es de interés verificar si las entropías informacionales propuestas son capaces de detectar tal fenómeno y verificar si en este caso $R(A | B)$ y $R(B | A)$ son negativas.

En la Figura (8.11(a)) se muestra la tendencia de la energía total del sistema, en este caso la distancia internuclear de equilibrio es 3.0426 Å.

En las Figuras (8.11(b)–8.11(e)), se muestra el comportamiento de las entropías tipo H . Que se presentan en el siguiente orden. La Figura (8.11(b)) corresponde a las entropías condicionales, la Figura (8.11(c)) a las entropías de los subsistemas, la Figura (8.11(d)) a la entropía conjunta, la Figura (8.11(e)) a la información mutua.

Las entropías condicionales tipo H , presentan un mínimo local en 1.5 Å, que al analizarlo mediante el laplaciano de la densidad (Véase la Figura (8.12a)) encontramos que a esa distancia internuclear hay una remoción de carga (zonas azules). En el intervalo 2.9–3.01 Å, estas entropías presentan un máximo local, que está asociado a la estructura de mínima energía, (Ver la Figura (8.12)b). En 4.2 Å, Figura (8.12c), el potencial electrostático molecular presenta una zona de acumulación de carga en la parte media–lateral de los átomos de sodio (zonas rojas), y en 6.5 Å, este mismo parámetro nos muestra un sistema completamente disociado, Figura (8.12d), a partir de dicho punto, desde la perspectiva del comportamiento clásico de la información implica seguir de manera rigurosa las siguientes cotas:

1. $H(A) > H(A | B)$ y $H(B) > H(B | A)$; el condicionamiento disminuye la información de los sistemas.
2. $H(A) + H(B) < H(A, B)$ la información de las partes no puede ser mayor que la de todo el sistema.
3. $H(A | B) + H(B | A) > H(A : B)$ la información que los sistemas comparten es menor que la información compartida.

En las Figuras (8.13(a)–8.13(d)) se muestran las tendencias de las entropías tipo R , las cuales se presentan en el siguiente orden; La Figura (8.13(a)) corresponde a las entropías condicionales, la Figura (8.13(b)) a las entropías de los subsistemas, la Figura (8.13(c)) a la entropía conjunta, la Figura (8.13(d)) y en la Figura (8.15) se hace la comparación de todas las entropías tipo R . En la Figuras (8.14) se muestran las isosuperficies del laplaciano de la densidad electrónica y del potencial electrostático molecular correspondientes a los puntos críticos de las entropías tipo R .

A diferencia de las entropías tipo H , las entropías condicionales tipo R , véase la Figura (8.13(a)), presentan más estructura y en este caso, se logró detectar la presencia de atractores no nucleares en la zona 0.6–0.9 Å, lo cual se puede observar en las isosuperficies del laplaciano de la densidad de la Figura (8.14), en la Figura (8.14a) se nota que en la parte media de los átomos de sodio y en las zonas laterales de los mismos hay algunos atractores de tipo no nuclear (las zonas de acumulación de carga están en color rojo), lo cual es de esperarse debido a la distancia internuclear que estos átomos presentan (0.6 Å, y la distancia internuclear de equilibrio

es de 3.0426 Å), sin embargo, la presencia de este atractor sólo es en esta distancia ya que en 0.7 Å, la acumulación de carga detectada en 0.6 Å, cambia por una remoción de carga paulatina hasta 0.9 Å, lo cual se manifiesta en el cambio de curvatura de las entropías condicionales y se comprueba mediante las isosuperficies del laplaciano de la densidad electrónica (ver Figuras (8.14b), (8.14c) y (8.14d)), desde la perspectiva de la energía esta zona corresponde a una estructura de muy alta energía (inestable) y sólo las entropías condicionales tipo R muestran cómo es que éste proceso de estabilización se lleva a cabo, a una distancia de 1.7 Å, encontramos que las entropías condicionales presentan un mínimo que está asociado al proceso de estabilización de la densidad electrónica lo cual se puede visualizar mediante las isosuperficies del laplaciano de la densidad electrónica mostradas en la Figura (8.14), en dicho punto no hay remoción de carga alguna. En 2.3 Å, las entropías condicionales presentan un máximo local, que corresponde a una disminución de carga de la zona del enlace de los átomos como se observa en la isosuperficie del laplaciano de la densidad electrónica, Figura (8.14). En el intervalo 3.5–4.5 Å, hay una acumulación de carga (ver las isosuperficies del potencial electrostático molecular en la Figura (8.14), la zona roja, representa una acumulación de carga) lo cual puede ser atribuido a un posible atractor no nuclear. A una distancia internuclear de 5.0 Å, este posible atractor desaparece, lo cual es detectado por las entropías condicionales como un mínimo. Finalmente el mínimo en 6.3 Å, y el máximo de éstas entropías nos muestran que a partir de tales distancias ya no existen correlaciones de tipo clásico.

En lo que respecta a las entropías de los subsistemas, $R(A)$ y $R(B)$, la entropía conjunta $R(A, B)$ y la información mutua $R(A : B)$, tienen los mismos puntos críticos que las entropías condicionales. Al comparar la entropía conjunta con la información mutua del sistema, encontramos que éstas presentan un comportamiento de tipo especular una con respecto a la otra. La información mutua de los subsistemas ha sido interpretada como una medida de la correlación dentro del contexto de la Teoría Clásica de la Información [104].

Uno de los aspectos más importantes de este sistema es que a partir de 1.4 Å, *ambas entropías condicionales son negativas*, con ello se corrobora que la negatividad de las entropías condicionales no se debe a la relación entre el espectro de eigenvalores de la matriz densidad de primer orden de cada uno de los subsistemas. Por tanto, existen sistemas tales que presentan entropías condicionales negativas debido a alguna propiedad física o química, que es uno de los requisitos suficientes, más no necesario, para establecer que un sistema presenta entrelazado [23].

Al analizar en conjunto todas las entropías informacionales tipo R , Figura (8.15), encontramos que en 1.5 Å, $R(A | B) + R(B | A) = R(A | B) = R(B | A)$ y además $R(A) = R(B) = R(A : B) = R(A, B)$, por lo que a partir de esta distancia internuclear el sistema manifiesta el entrelazado y con ello el comportamiento cuántico, en este punto $R(A) = R(B) = R(A : B)$, es decir que la información de cualquiera de los subsistemas es igual a la información compartida por los mismos, por lo tanto se concluye que el sistema está totalmente correlacionado².

Nótese que a partir de este punto, las cotas de las entropías informacionales obtenidas por Shannon no se obedecen, ya que $R(A : B) > R(A) = R(B) > R(A, B)$, lo cual puede ser interpretado de la siguiente manera, la información de las partes, $R(A)$ y $R(B)$, es mayor que la de todo el sistema, $R(A, B)$, y la información que está compartida, $R(A : B)$, es mayor que el contenido total de información, $R(A, B)$.

²Véase la figura 5.3 de la pagina 54.

En ámbito experimental, el entrelazado de los sistemas ha sido puesto en evidencia por medio de trampas de iones [25,58,69,70,106,112], por medio de fotones [69,115], fonones [53], por medio de RMN [19,60], asimismo esta propiedad ha sido aplicada a la criptografía cuántica [15,38,51]. En este tipo de experimentos se han empleado básicamente: *Ca*, *Be* y *Mg*. Por tal circunstancia, es de interés analizar los procesos de disociación de estos sistemas, con la finalidad de determinar si presentan un comportamiento cuántico como el descrito anteriormente. Nótese que estos sistemas están agrupados en el bloque “s” de la tabla periódica, por tanto, una de las hipótesis es que es posible encontrar un comportamiento cuántico en el resto de elementos de dicho bloque y con ello determinar si existe alguna propiedad periódica que nos permita predecir si algún sistema químico va a manifestar algún tipo de comportamiento cuántico.

En las Figuras (8.16–8.20) se presentan las entropías informacionales tipo R de cada una de las disociaciones de Li_2 , Be_2 , K_2 , Ca_2 y Mg_2 , calculadas con el mismo método y base. Las cuales, al igual que en el caso del Na_2 , presentan un comportamiento típicamente cuántico:

1. $R(A | B) < 0$ y $R(B | A) < 0$.
2. $R(A) > R(A, B)$ y $R(B) > R(A, B)$.
3. $R(A : B) > R(A, B)$.

Es interesante notar que en los procesos de disociación de Na_2 , Mg_2 , K_2 , Ca_2 se logran las siguientes igualdades de las siguientes entropías

$$R(A | B) = R(B | A) = R(A | B) + R(B | A)$$

y

$$R(A) = R(B) = R(A, B) = R(A : B),$$

las cuales pueden ser tomadas como punto de referencia, a partir del cual se manifiesta el comportamiento cuántico de estos sistemas, las distancias a las que se logran dichas igualdades se listan a continuación:

Sistema	Distancia internuclear [Å]	Distancia internuclear de equilibrio [Å]
Na_2	1.7	3.0426
Mg_2	3.0	4.1542
K_2	5.1	3.9562
Ca_2	6.5	4.8554

Cuadro 8.1: Distancias internucleares a partir de las cuales se manifiesta el comportamiento cuántico de los sistemas.

Una posible definición para establecer el grado de entrelazamiento de los sistemas es

$$\Lambda = R(A : B) - R(A, B)$$

el cual estaría sujeto a las siguientes condiciones:

$$\Lambda = \begin{cases} \Lambda > 0 : R(A : B) > R(A, B) & \implies \text{comportamiento cuántico} \\ \Lambda = 0 : R(A : B) = R(A, B) & \implies \text{correlación total} \\ \Lambda < 0 : R(A : B) < R(A, B) & \implies \text{comportamiento clásico.} \end{cases}$$

en la siguiente Figura se muestra el comportamiento de Λ mediante diagramas de Venn,

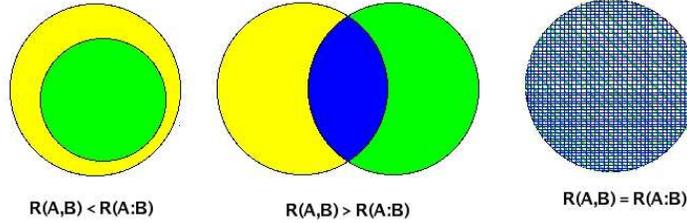


Figura 8.10: Representación del comportamiento de $\Lambda = R(A : B) - R(A, B)$, en donde $R(A : B)$ es la información compartida entre los subsistemas y $R(A, B)$ es la información total del sistema bipartita AB .

En el cuadro (8.2), se muestran los valores numéricos de Λ correspondientes al punto final de cada una de las disociaciones.

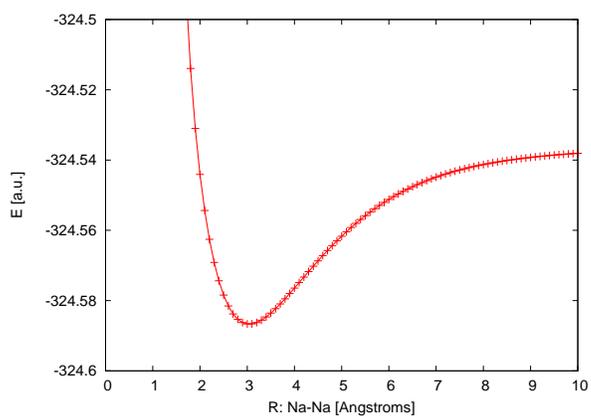
Sistema	$R(A : B)$	$R(A, B)$	Λ
Li_2	3.37946	40.77080	37.39142
Be_2	3.42948	44.57922	41.14973
Na_2	4.71189	6.59635	1.88446
Mg_2	4.72994	8.97626	4.24631
K_2	6.20472	5.41120	0.79350
Ca_2	5.42121	6.56360	1.14239

Cuadro 8.2: Valores de la entropía conjunta, información mutua y Λ , para los procesos de disociación de Li_2 , Be_2 , Na_2 , Mg_2 , K_2 y Ca_2 .

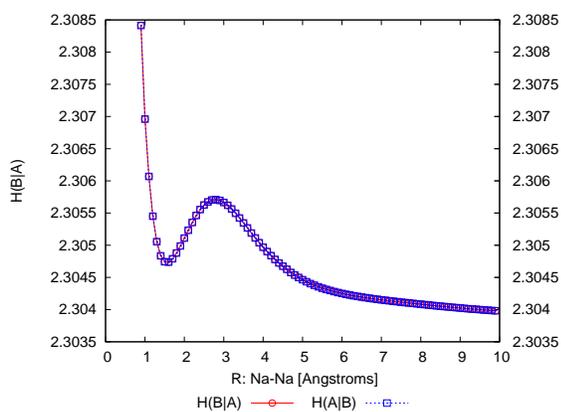
A través del cual se puede obtener ordenamiento decreciente de Λ :

$$Be_2 > Li_2 > Mg_2 > Na_2 > Ca_2 > K_2,$$

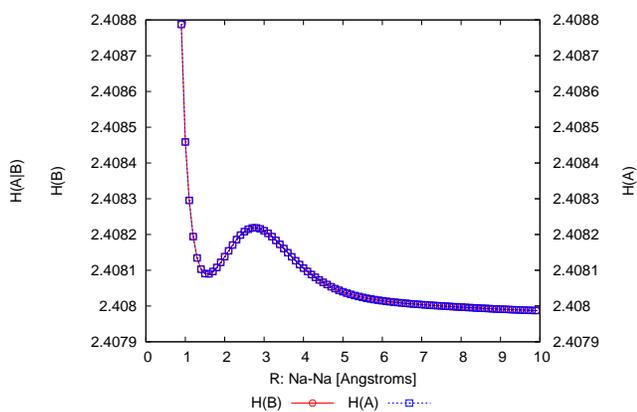
con lo cual notamos que el entrelazado de estos sistemas puede no estar relacionado directamente a alguna propiedad periódica de los mismos.



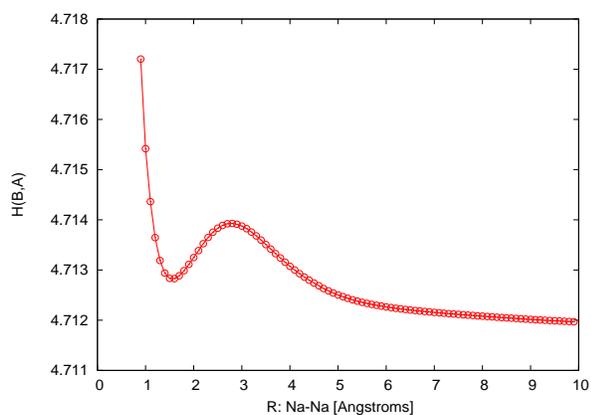
(a) Energía total.



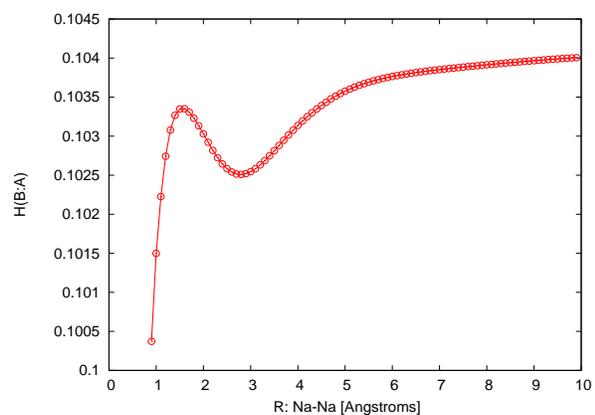
(b) Entropías condicionales.



(c) Entropías de los subsistemas.



(d) Entropía conjunta.



(e) Información mutua.

Figura 8.11: Tendencia de la energía total y de las entropías tipo H del proceso de disociación del Na_2 .

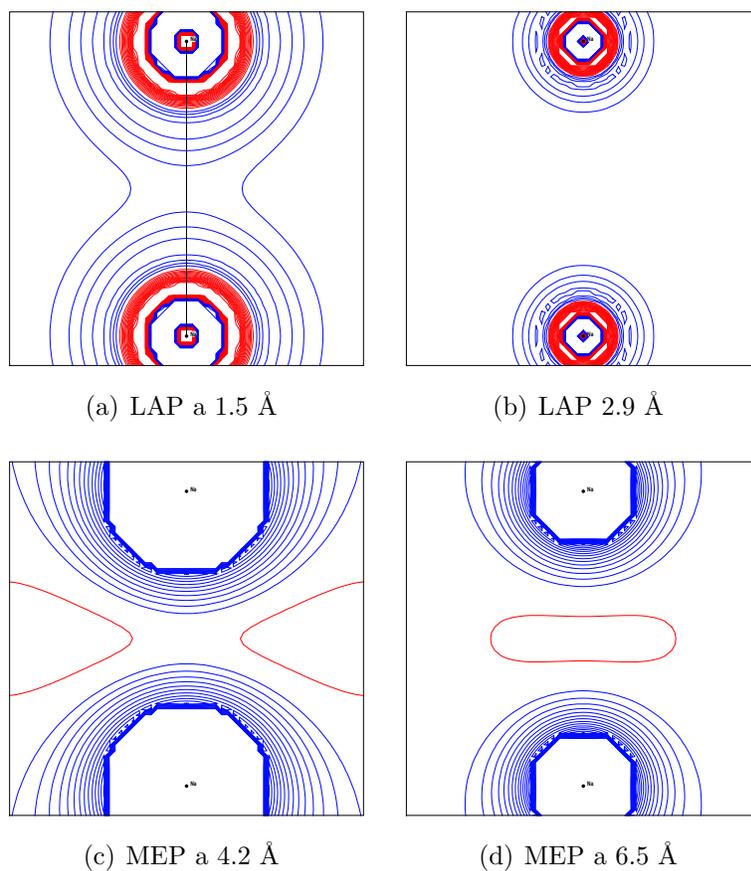
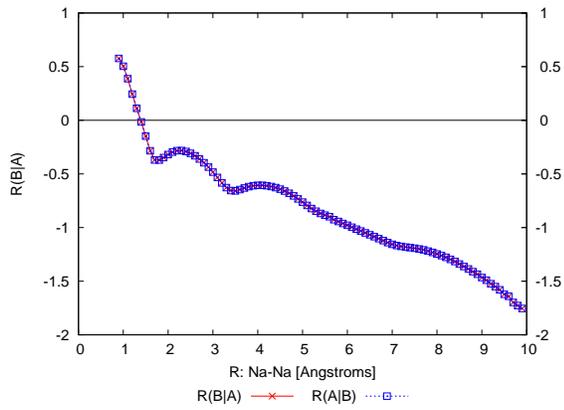
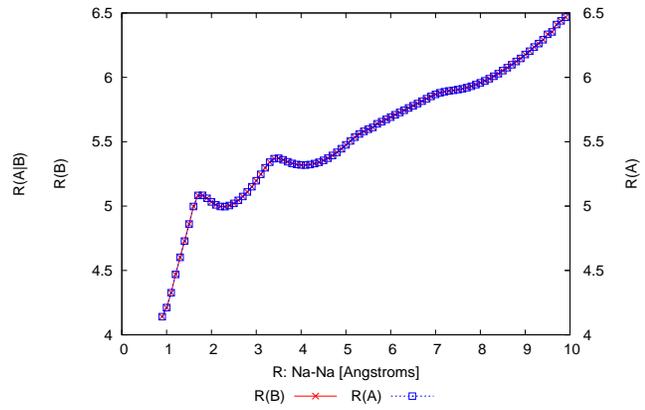


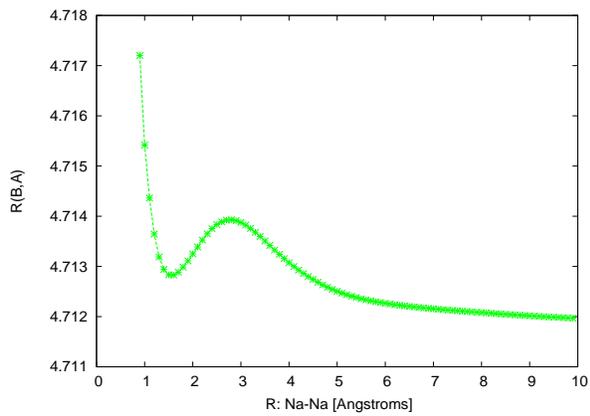
Figura 8.12: Isosuperficies del laplaciano de la densidad (LAP) y del potencial electrostático molecular (MEP) Na_2 a diferentes distancias internucleares que corresponden a los puntos críticos de las entropías tipo H mostradas en la Figura (8.11).



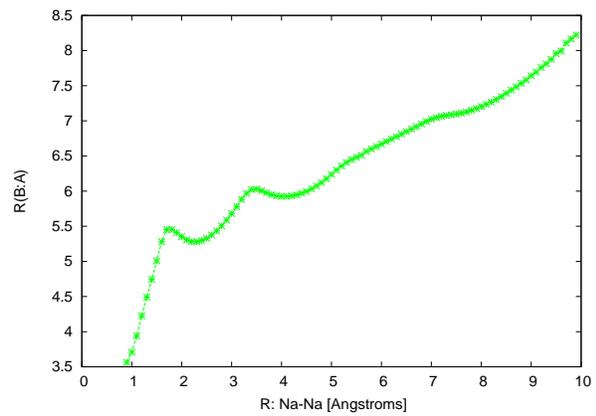
(a) Entropías condicionales.



(b) Entropías de los subsistemas.



(c) Entropía conjunta.



(d) Información mutua.

Figura 8.13: Tendencias de las entropías tipo R del proceso de disociación del Na_2 .

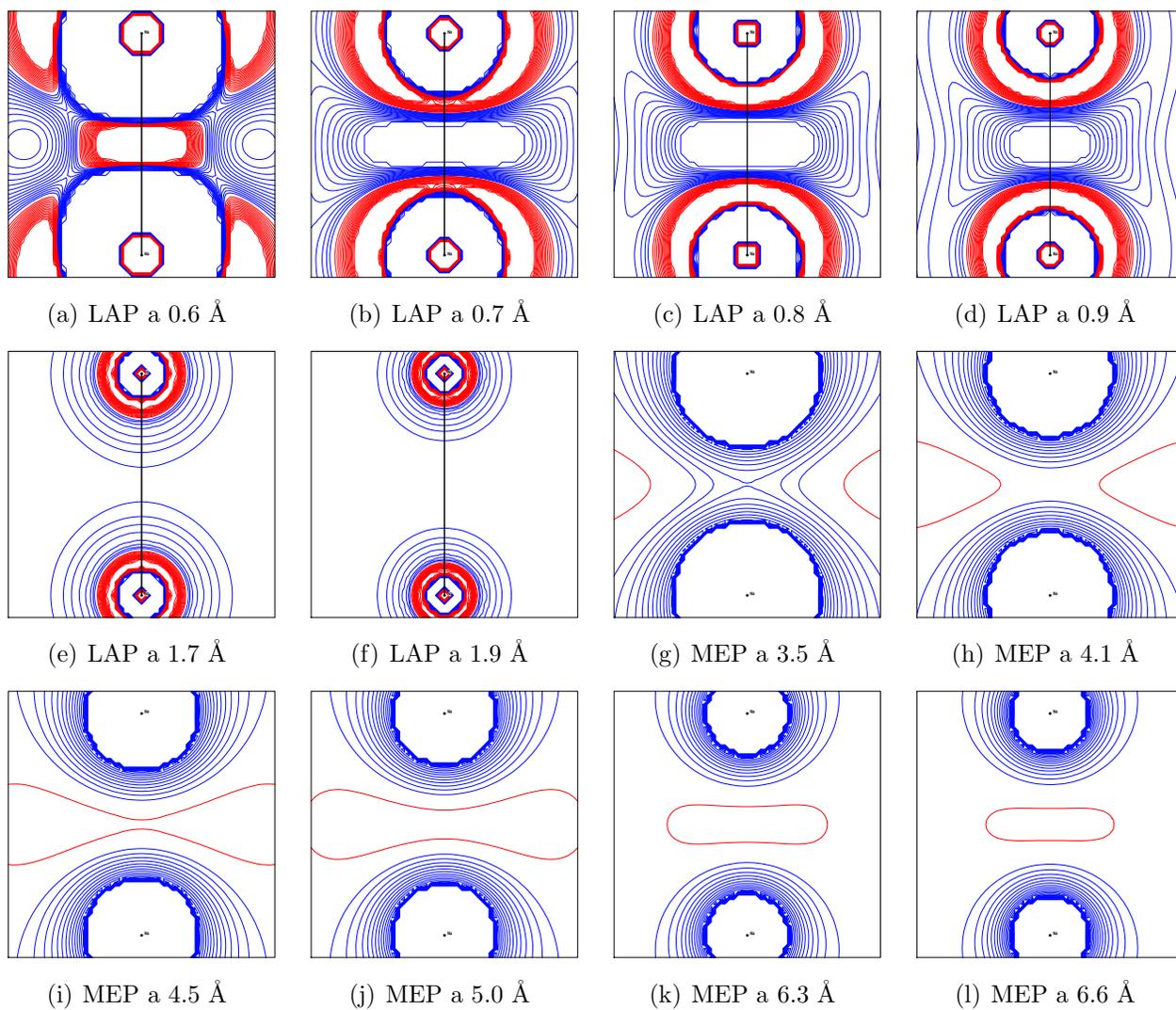


Figura 8.14: Isosuperficies del laplaciano de la densidad (LAP) y del potencial electrostático molecular (MEP) del Na_2 a diferentes distancias internucleares que corresponden a los diferentes puntos críticos observados en las tendencias de las entropías tipo R mostradas en la Figura (8.13).

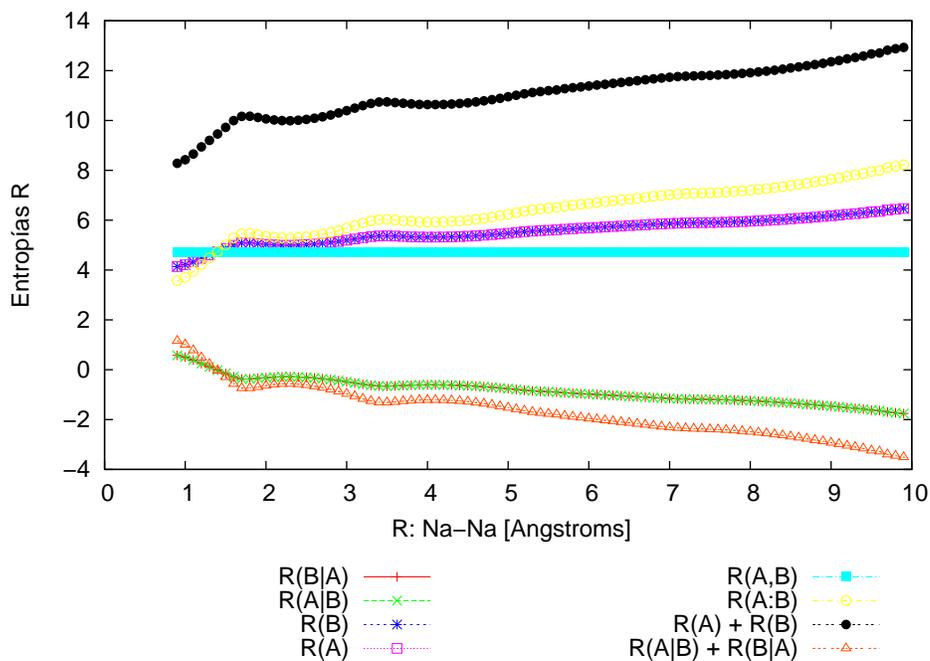


Figura 8.15: Comportamiento de todas las entropías informacionales tipo R en el proceso de disociación del Na_2 .

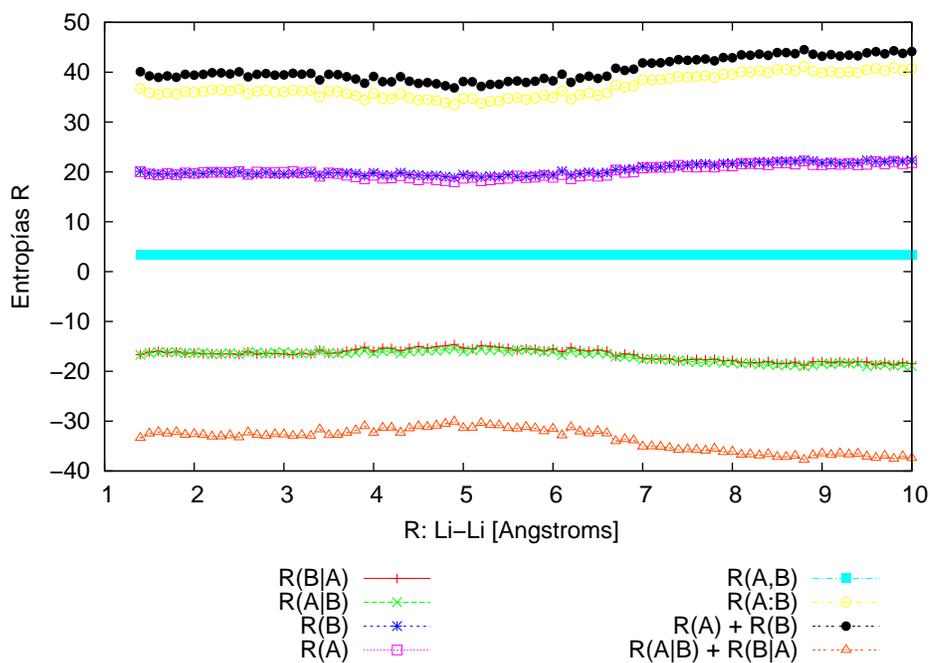


Figura 8.16: Comportamiento de todas las entropías informacionales tipo R en el proceso de disociación del Li_2 .

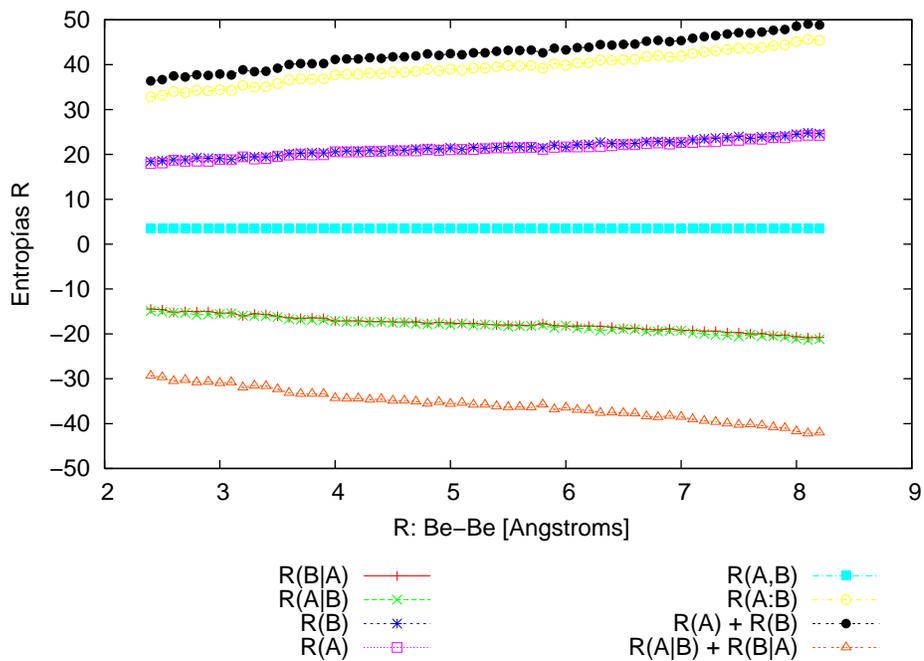


Figura 8.17: Comportamiento de todas las entropías informacionales tipo R en el proceso de disociación del Be_2 .

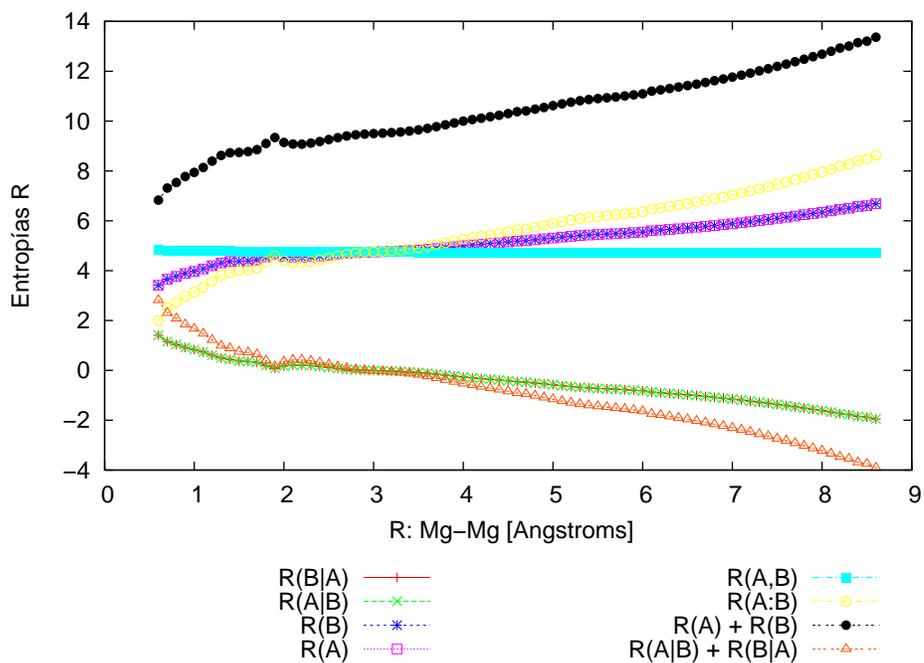


Figura 8.18: Comportamiento de todas las entropías informacionales tipo R en el proceso de disociación del Mg_2 .

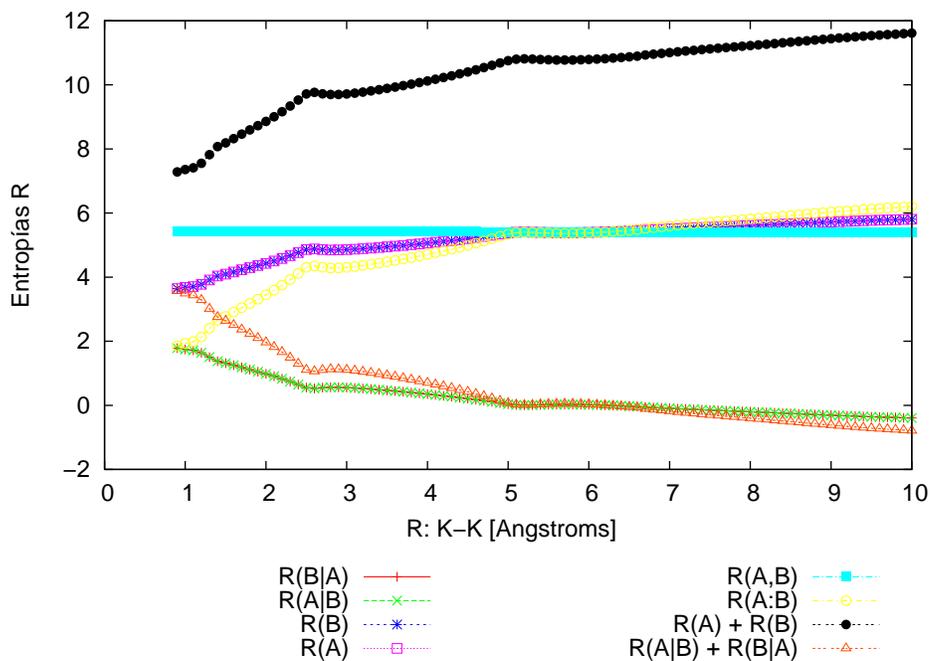


Figura 8.19: Comportamiento de todas las entropías informacionales tipo R en el proceso de disociación del K_2 .

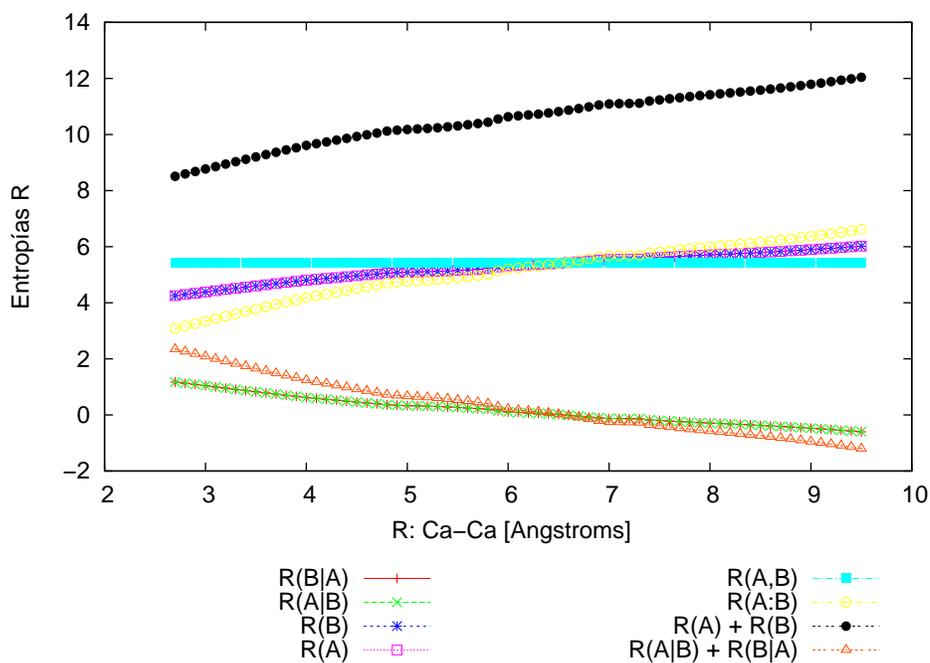


Figura 8.20: Comportamiento de todas las entropías informacionales tipo R en el proceso de disociación del Ca_2 .

8.4. Reacción S_N2 : $H^- + CH_4 \longrightarrow CH_4 + H^-$: Entropías cuánticas marginales y no marginales

Una de las reacciones más estudiadas en la Química Teórica ha sido la la reacción de desplazamiento del metano,

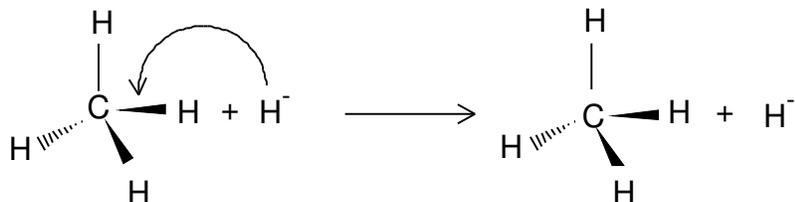


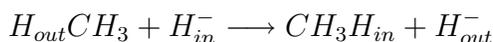
Figura 8.21: Reacción de desplazamiento.

La cual ha sido clasificada como S_N2 . Esta reacción se caracteriza por tener un perfil energético (total y de correlación) simétrico (ver las figuras 8.22(a), 8.22(b) y 8.22(c)).

Para propósitos de nuestro trabajo empleamos los datos geométricos del estado de transición obtenidos por Shi y Boyd [111] y calculamos el IRC de esta reacción con Gaussian 03 [37], empleando el método MP2 y la base 6-311G, para calcular las probabilidades atómicas naturales de cada punto de la trayectoria de reacción se utilizó NBO 5.0 [40].

En este estudio se hizo una comparación de las tendencias de las entropías tipo H y tipo R con los cambios de las propiedades físicas y químicas de este proceso, tales como: los parámetros geométricos, el momento dipolar, las frecuencias de los modos normales de vibración, las cargas de los subsistemas, la dureza, la blandura, entre otros. A partir de dicha comparación se pudo establecer que las variaciones que muestran las entropías informacionales están directamente relacionadas con los cambios físicos de la densidad electrónica, de forma que al caracterizar este tipo de procesos mediante el esquema de entropías informacionales marginales y no marginales, se obtiene información complementaria que permite determinar de una mejor manera los cambios que ocurren con la densidad del sistema.

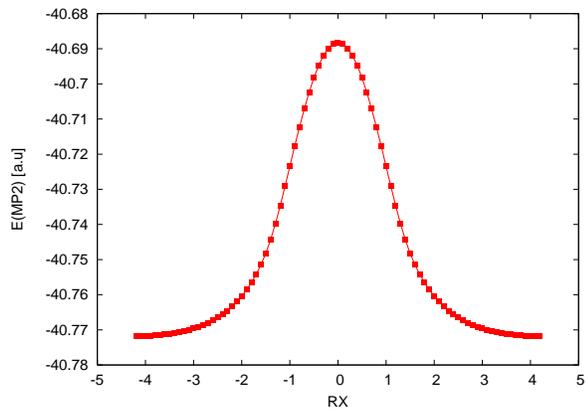
Para la caracterización de este proceso se emplearon diferentes esquemas de condicionamiento, de acuerdo a la siguiente relación,



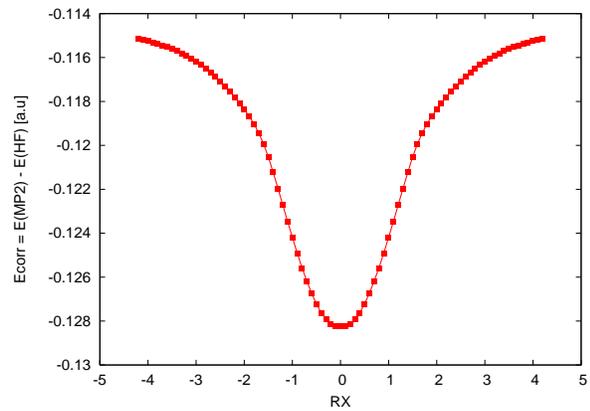
cada uno de los subsistemas empleados, se seleccionó con un sentido químico, y el primero de ellos, consistió en; $\{B\} = CH_3$ y $\{A\} = H_{in}^-H_{out}$. El segundo esquema fue: $\{B\} = CH_3H_{in}^-$ y $\{A\} = H_{out}$ y finalmente el tercer esquema: $\{B\} = CH_3H_{out}$ y $\{A\} = H_{in}^-$.

Los resultados y discusión se presentan por secciones. En la sección 8.4.1, pág. 105, se muestran los resultados de las entropías informacionales, con el primer esquema de condicionamiento: $B = \{CH_3\}$ y $\{A\} = H_{in}^-H_{out}$. Los resultados de las entropías tipo H se muestran en la pág. 105 y los resultados de las entropías tipo R en la pág 111.

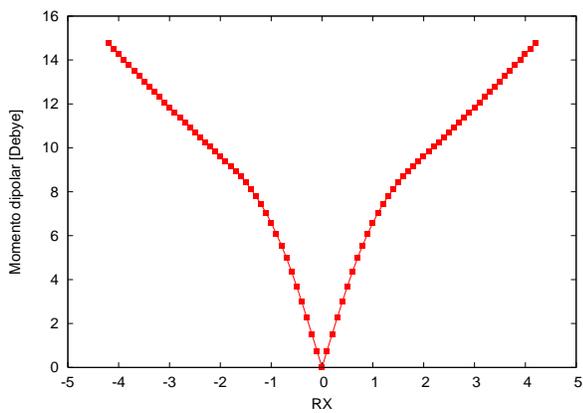
En la página 115, se muestran los resultados de las entropías informacionales, con el condicionamiento: $\{B\} = CH_3H_{in}^-$ y $\{A\} = H_{out}$. Los resultados de las entropías tipo H se muestran en la pág. 115 y los resultados de las entropías tipo R en la pág 119.



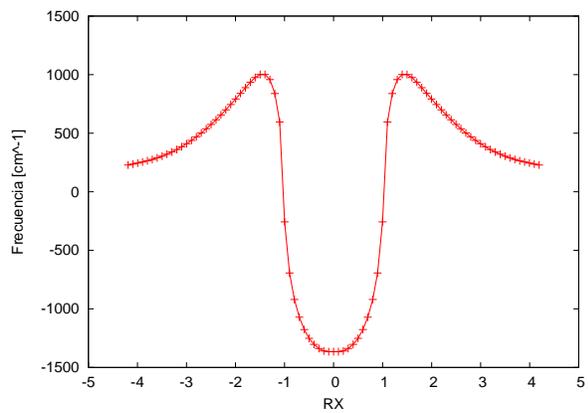
(a) Energía total.



(b) Energía de correlación



(c) Momento dipolar



(d) Frecuencias

8.4.1. Resultados del condicionamiento $\{B\} = CH_3$, y $\{A\} = H_{in}^-H_{out}$: Entropías tipo H

En las Figuras (8.23(a)–8.23(d)) se muestran las entropías tipo H . La Figura (8.23(a)) corresponde a las entropías condicionales, en la Figura (8.23(b)) se presentan las entropías de los subsistemas, en la Figura (8.23(e)) se muestra la tendencia de la entropía conjunta y en la Figura (8.23(d)) se muestra el comportamiento de la información mutua.

En lo que concierne a las entropías condicionales tipo H , Figura (8.23(a)), tenemos que tanto $H(B | A)$ como $H(A | B)$ tienen un comportamiento simétrico con respecto al estado de transición, $H(H_{in}^-H_{out} | CH_3) = \text{mín}$, y en $RX = -0.69876$ y $RX = 0.69876$, $H(CH_3 | H_{in}^-H_{out}) = \text{máx}$, y de acuerdo a las isosuperficies del potencial electrostático molecular, Figuras (8.24), tales máximos delimitan la zona de ruptura y formación del enlace. La entropía del subsistema CH_3 , $H(CH_3)$, presentada en la Figura (8.23(b)), tiene dos mínimos en $RX = -1.49841$ y en $RX = 1.49841$, lo cual se debe a la simetría del sistema, en tanto que en $RX = 0.00000$, tal entropía tiene su valor máximo, los mínimos delimitan la zona en la que ocurre el proceso de inversión de la configuración, lo cual se comprueba al contrastar la entropía $H(CH_3)$ con la variación del ángulo interno del metilo, Figura (8.25(a)), así como con las distancias $C-H_{out}$ y $C-H_{in}^-$, Figura (8.25(b)) y con la variación de las cargas de los subsistemas, Figura (8.22).

Un aspecto importante, es que la zona caracterizada por esta entropía tiene está relacionada con los cambios en la blandura y la dureza, Figuras (8.25(e)) y (8.25(d)) respectivamente, así como por una zona de frecuencias negativas, Figura (8.25(c)). Esto nos lleva a concluir que en la región delimitada por los mínimos de la entropía $H(CH_3)$, ocurren la mayor parte de los cambios físicos y químicos importantes de este proceso. Por tanto, una sola de las entropías empleadas en este trabajo nos permite obtener información de los cambios en: la densidad, las cargas, los parámetros geométricos de la estructura, la dureza, la blandura y las frecuencias.

En el caso de la entropía conjunta, $H(CH_3, H_{in}^-H_{out})$, y de la información no común, $H(CH_3 | H_{in}^-H_{out}) + H(H_{in}^-H_{out} | CH_3)$, ambas presentan una estructura similar a la de la energía, mientras que la información mutua, $H(CH_3 : H_{in}^-H_{out})$ presenta dos mínimos, en $RX = -0.79875$ y en $RX = 0.79875$ y un máximo local en $RX = 0$, esta región corresponde a un proceso de transferencia de carga del hidruro hacia el átomo de carbono para producir la inversión de la configuración y la sustitución del hidruro, ver la Figura (8.26), en la que las isosuperficies del potencial electrostático molecular presentan unas minúsculas zonas de desplazamiento de carga (zonas azules en el hidruro) las cuales se incrementan hasta obtener el correspondiente estado de transición.

Al igual que en el caso de las disociaciones homo- y heteronucleares, estas entropías presentan el siguiente comportamiento general,

1. $H(CH_3 | H_{in}^-H_{out}) > 0$ y $H(H_{in}^-H_{out} | CH_3) > 0$.
2. $H(CH_3 | H_{in}^-H_{out}) < H(CH_3)$.
3. $H(CH_3, H_{in}^-H_{out}) > H(CH_3 : H_{in}^-H_{out})$.
4. $H(CH_3, H_{in}^-H_{out}) < H(CH_3) + H(H_{in}^-H_{out})$.
5. $H(CH_3 | H_{in}^-H_{out}) + H(H_{in}^-H_{out} | CH_3) > H(CH_3 : H_{in}^-H_{out})$.

lo que nos indica que el sistema se comporta clásicamente. Sin embargo, como veremos en la sección de los resultados de las entropías tipo R , el comportamiento cuántico de este sistema bajo este esquema de condicionamiento no puede ser puesto en evidencia por las entropías tipo H .

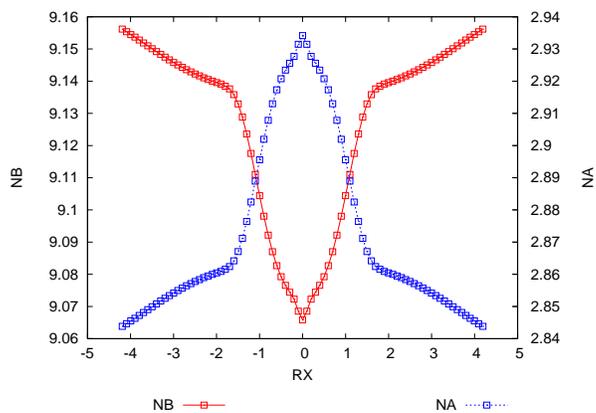
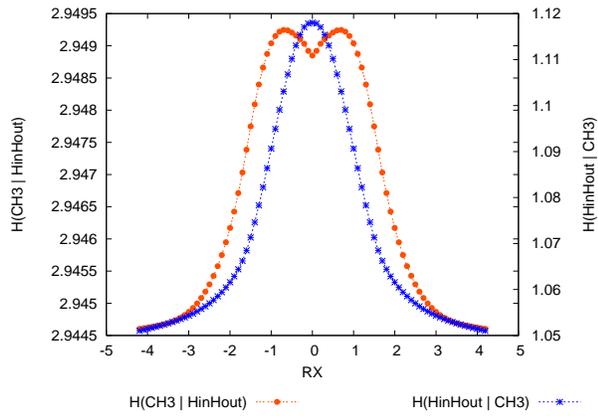
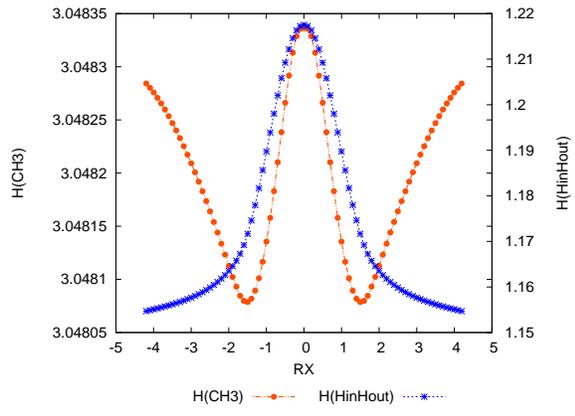


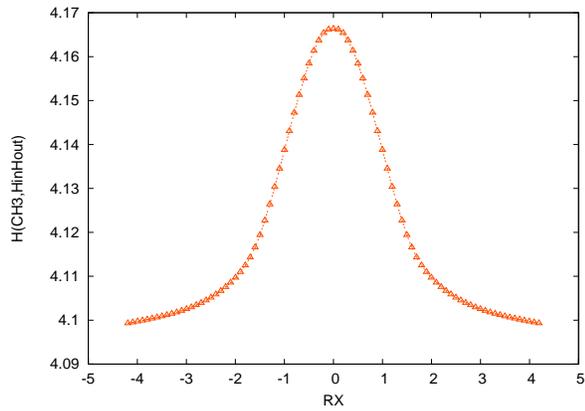
Figura 8.22: Comportamiento de las cargas de los subsistemas, en la reacción de desplazamiento S_N2 , del metano. En donde $N_B = CH_3$, y $N_A = H_{in}^- H_{out}$.



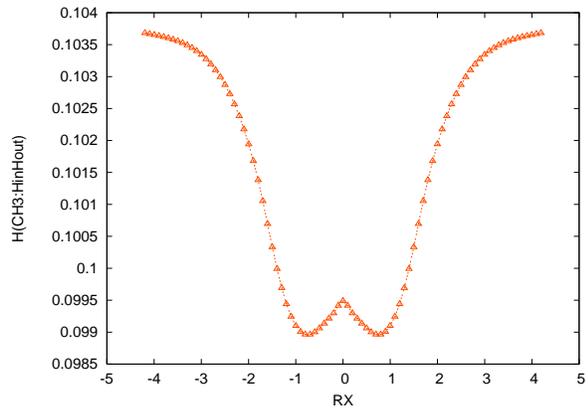
(a) Entropías condicionales.



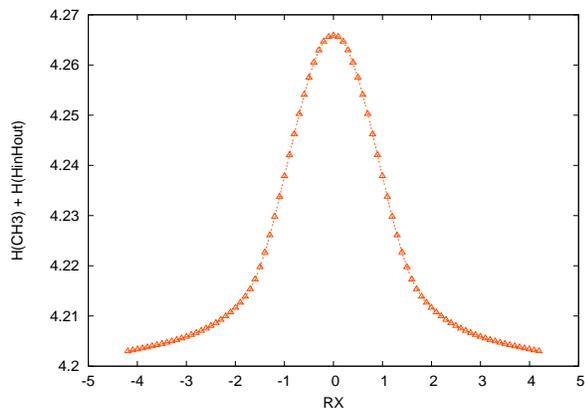
(b) Entropías de los subsistemas.



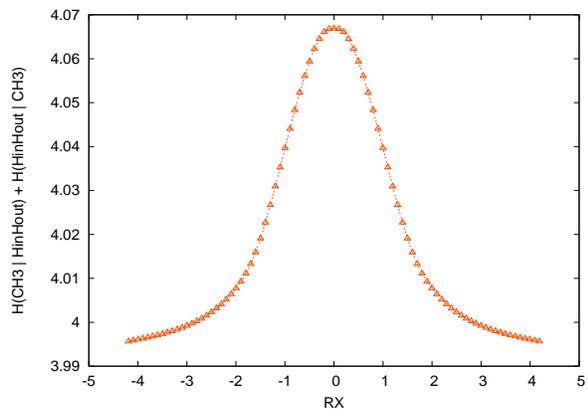
(c) Entropía conjunta.



(d) Comportamiento de la información mutua.

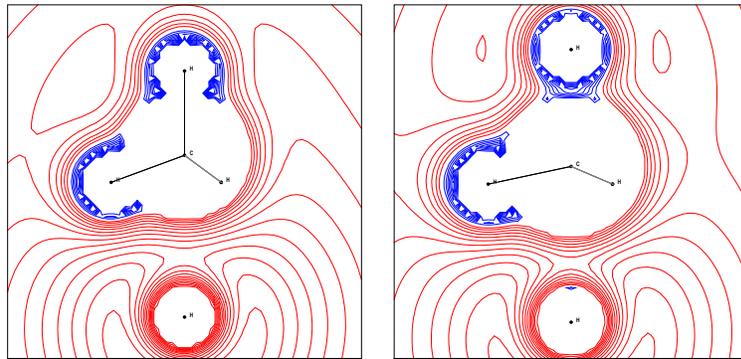


(e) Suma de las entropías de los subsistemas.



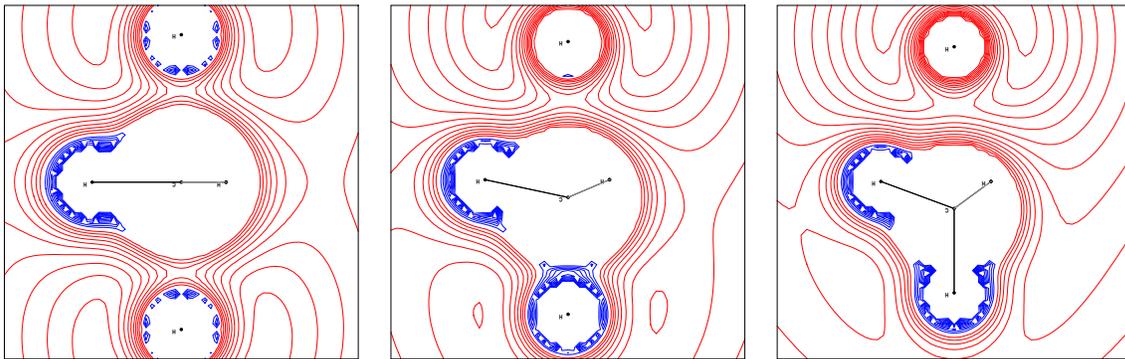
(f) Información no común.

Figura 8.23: Tendencias de las entropías informacionales tipo H .



(a) $RX = -1.49841$

(b) $RX = -0.69876$



(c) $RX = 0.00000$

(d) $RX = 0.69876$

(e) $RX = 1.49841$

Figura 8.24: Isosuperficies del potencial electrostático molecular de los puntos críticos de las tendencias de las entropías tipo H .

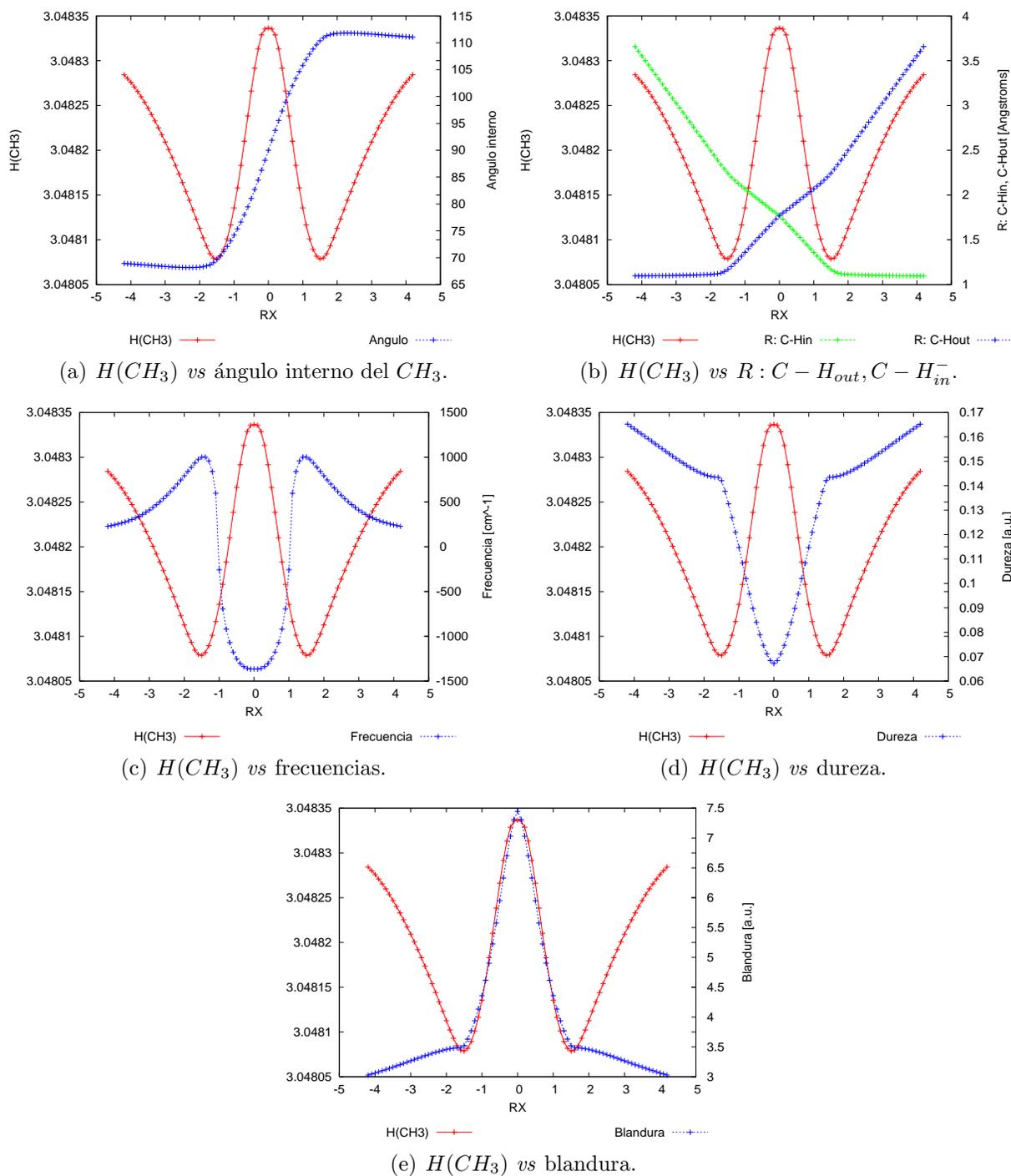


Figura 8.25: Comparación de $H(CH_3)$ con el ángulo interno, distancias, frecuencia, dureza y blandura.

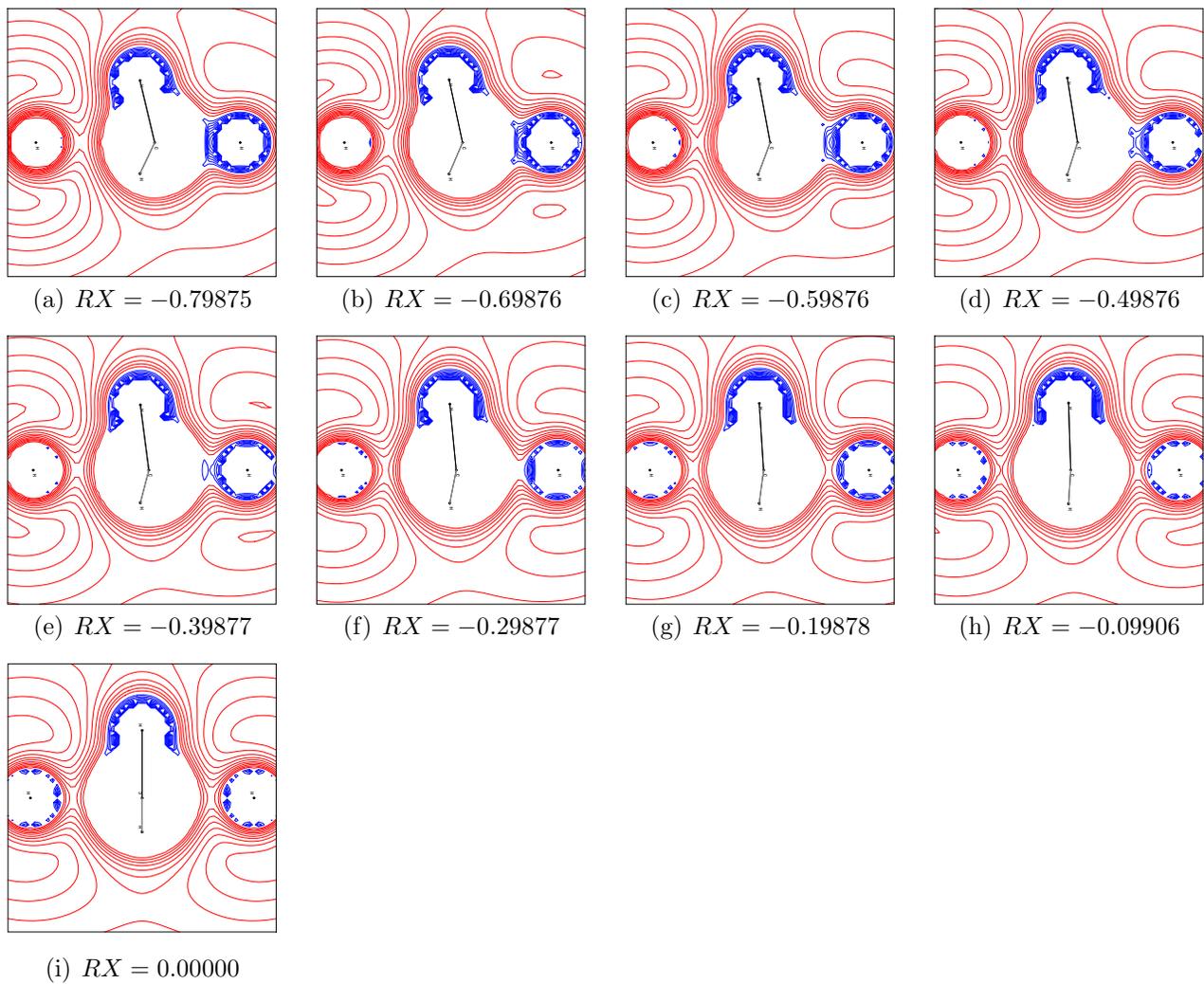


Figura 8.26: Isosuperficies del potencial electrostático molecular en la zona $-0.79875 \leq RX \leq 0.00000$ que corresponden a la zona de puntos críticos de las entropías tipo H mostradas en la Figura (8.25). Solo se considera este intervalo ya que es un proceso equivalente en la zona $0.00000 \leq RX \leq 0.79875$.

8.4.2. Resultados del condicionamiento $\{B\} = CH_3$, y $\{A\} = H_{in}^-H_{out}$: Entropías tipo R

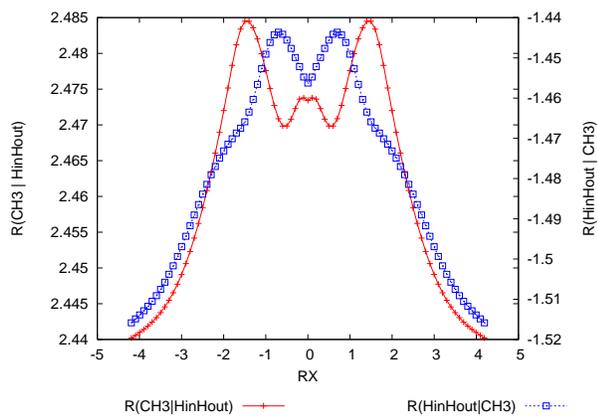
En las Figuras (8.27(a)–8.27(f)) se presenta el comportamiento de las entropías tipo R , las cuales presentan una mejor estructura que las entropías tipo H . En la Figura (8.27(a)), se muestran las tendencias obtenidas con las entropías condicionales tipo R , en las que $R(CH_3 | H_{in}^-H_{out}) > 0$ y $R(H_{in}^-H_{out} | CH_3) < 0$. En el caso de $R(CH_3 | H_{in}^-H_{out})$ presenta tres zonas acotadas por mínimos y máximos: La primer zona está acotada por dos máximos en $-1.39861 < RX < 1.39861$, la segunda zona está acotada por dos mínimos en $-0.49876 < RX < 0.49876$ y la tercer zona corresponde a dos máximos en $-0.09906 < RX < 0.09906$, Figura (8.27(a)).

La entropía $R(H_{in}^-H_{out} | CH_3)$, Figura (8.23(a)), presenta dos zonas acotadas por dos cambios en la curvatura en $-2.09770 < RX < 2.09770$ que corresponde al cambio de curvatura de la tendencia del ángulo interno, Figura (8.28(a)), y con un cambio en la curvatura abrupto de la blandura, Figura (8.28(b)), en las distancias de enlace H_{in}^-C y H_{out}^-C , Figura (8.28(c)), así como con las frecuencias, Figura (8.28(d)). Así mismo en la tendencia de la entropía $R(H_{in}^-H_{out} | CH_3)$ hay dos máximos en $-0.69876 < RX < 0.69876$, que corresponden al proceso de transferencia de carga del hidruro hacia el metilo lo cual se comprueba con las tendencias de las cargas de los subsistemas mostradas en la Figura (8.22) para que finalmente ocurra la sustitución y desplazamiento de los átomos de hidrógeno.

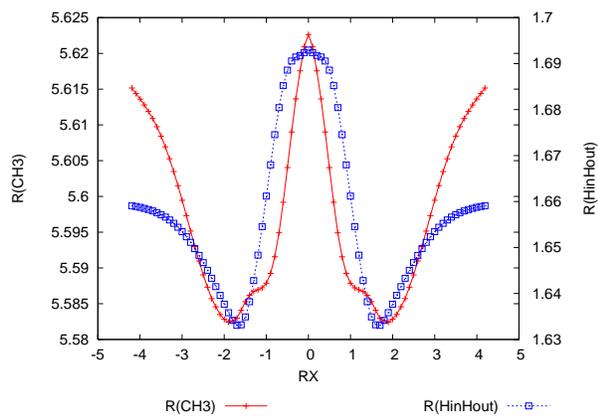
A diferencia del comportamiento de las entropías condicionales tipo H , las entropías $R(CH_3 | H_{in}^-H_{out})$ y $R(H_{in}^-H_{out} | CH_3)$ presentan todos los máximos y mínimos que se observaron en la estructura de todas las entropías tipo H , esto nos lleva a inferir que las entropías tipo R son en realidad unas entropías más generales que las entropías tipo H , esto es, las entropías tipo H , son un caso particular de las entropías tipo R , situación similar a la relación existente entre las entropías de Shannon (clásicas) y las entropías de von Neumann (cuánticas).

En la Figura (8.28(e)) se muestra el comportamiento del entrelazado, bajo este esquema de condicionamiento, calculado de la forma $\Lambda = R(A : B) - R(A, B)$. Es importante tener en cuenta que el grado de entrelazado³ de un sistema puede cambiar de acuerdo a la forma en la que se está condicionando, por ello para los diferentes esquemas de condicionamiento se calcula el grado de entrelazado, y en este caso encontramos que tiene una estructura de tipo especular a la información no común, Figura (8.27(f)), pero con signo contrario, de acuerdo a la interpretación de Λ , tenemos que si $\Lambda > 0$, entonces los efectos de tipo cuántico predominan en el proceso, pero si, $\Lambda < 0$ entonces son los efectos clásicos que rigen el proceso en cuestión, con lo cual tenemos que sólo en las etapas inicial y final Λ es lo suficientemente pequeño (tiende a ser positiva), con lo que los efectos cuánticos pudieran ser apreciables. Así, a medida que el proceso ocurre los efectos clásicos predominan sobre los cuánticos sin embargo en la zona $-0.99875 < RX < 0.99875$ encontramos que los efectos cuánticos predominan sobre los clásicos, ya que Λ se incrementa, así, si bien es cierto que los efectos clásicos en el proceso predominan, ya que en todo punto $\Lambda > 0$, es la zona en donde ocurren los procesos de transferencia de carga del hidruro hacia el átomo de carbono, y en donde los efectos cuánticos son importantes.

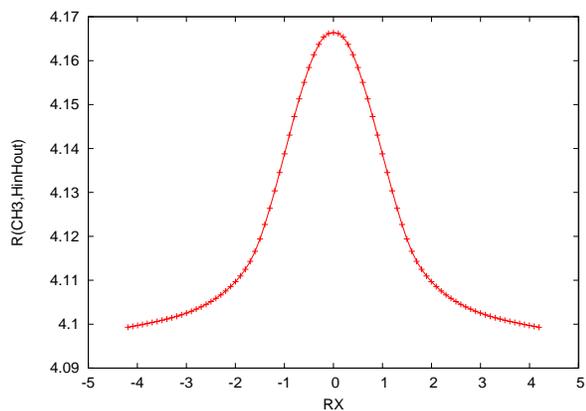
³Véase la figura (8.10) de la pág. 94 para la justificación de esta medida.



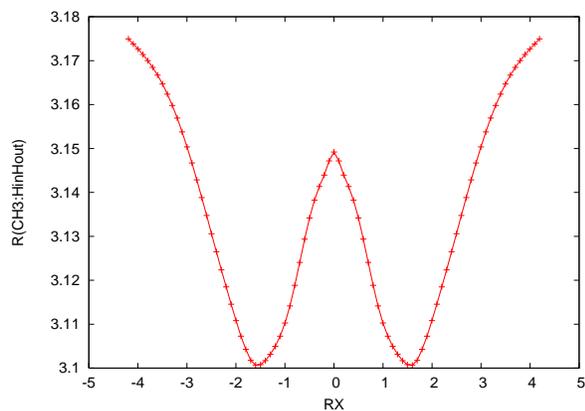
(a) Entropías condicionales.



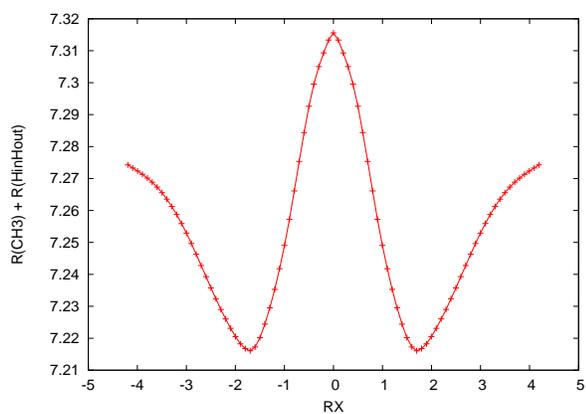
(b) Entropías de los subsistemas.



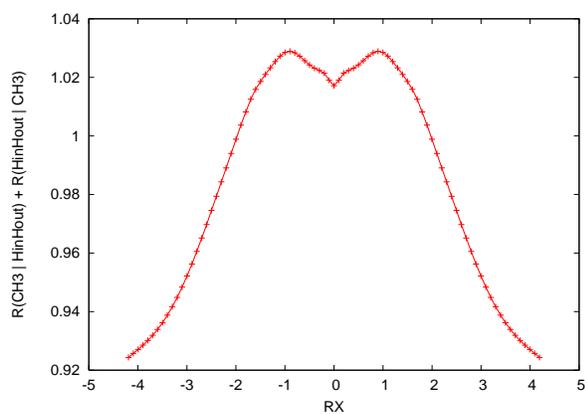
(c) Entropía conjunta.



(d) Información mutua.



(e) Entropías de los subsistemas.



(f) Información no común.

Figura 8.27: Tendencias de las entropías tipo R .

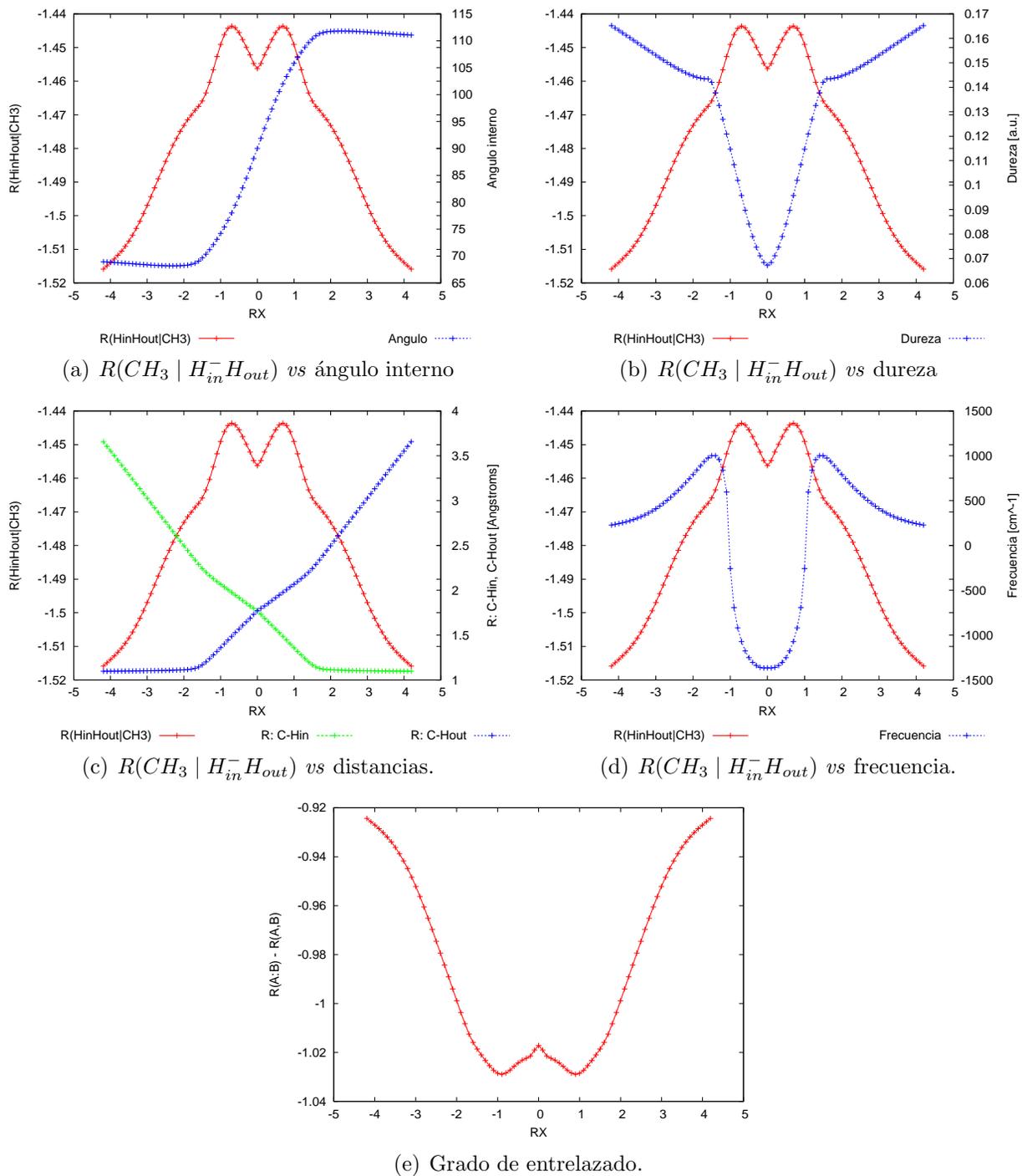


Figura 8.28: Tendencias de la entropía $R(CH_3 | H_{in}^- H_{out})$ con algunos parámetros geométricos y del grado de entrelazado.

8.4.3. Resultados del condicionamiento $\{B\} = CH_3H_{in}^-$ y $\{A\} = H_{out}$: Entropías tipo H

En las Figuras (8.30(a)–8.30(f)) se muestra el comportamiento de las entropías tipo H , empleando el condicionamiento $\{B\} = CH_3H_{in}^-$ y $\{A\} = H_{out}$, con lo cual se analiza el proceso de formación del enlace el cual también se ve reflejado en la variación de las cargas de los subsistemas, Figura (8.29). En la Figura (8.30(a)) se muestran las tendencias de las entropías condicionales, en las que se tiene que $\{CH_3H_{in}^- \} \lll \{H_{out}\}$, consecuentemente $\{H_{out}\}$ es el conjunto que predomina en el condicionamiento lo que a su vez implica que $H(CH_3H_{in}^- | H_{out}) > H(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$, y además, la estructura de $H(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$, Figura (8.30(a)), posee una estructura similar a la estructura de $H(H_{out})$.

Ambas entropías condicionales tipo H , Figura (8.30(a)), presentan un máximo en $RX = -1.09874$, que corresponde a la zona en la que se lleva a cabo la inversión de la configuración, lo cual se comprueba al comparar las tendencias de las entropías con la variación del ángulo interno y con la distancia $C-H_{out}$, Figuras (8.31), nótese que la distancia presenta un punto de inflexión que coincide con los máximos que presentan las entropías condicionales.

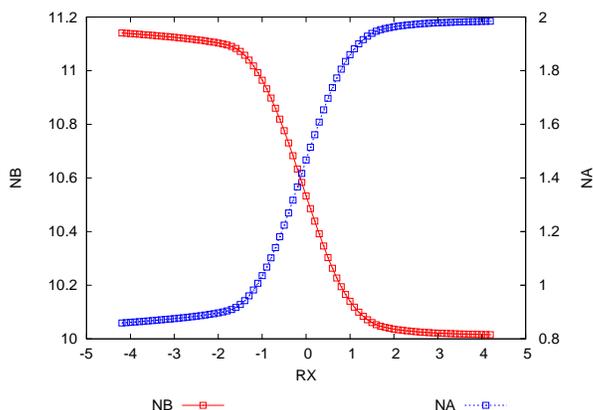
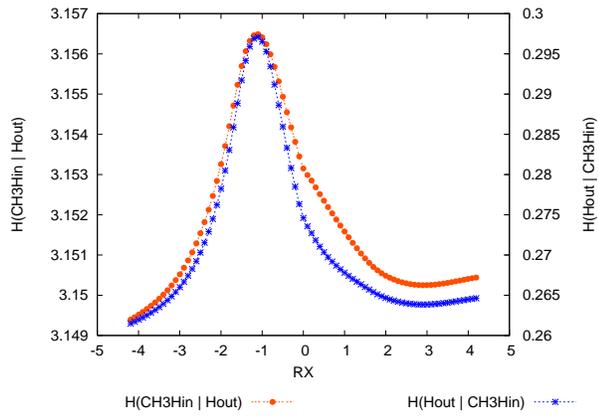
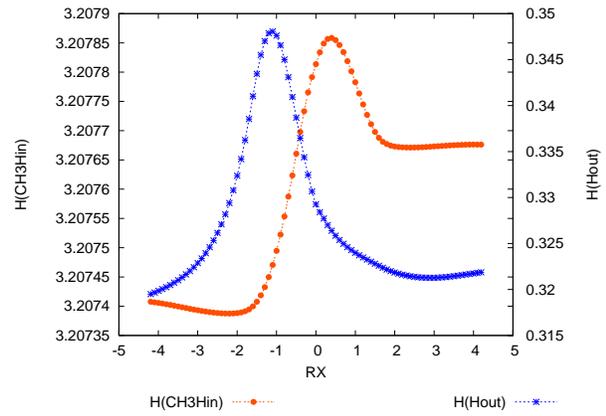


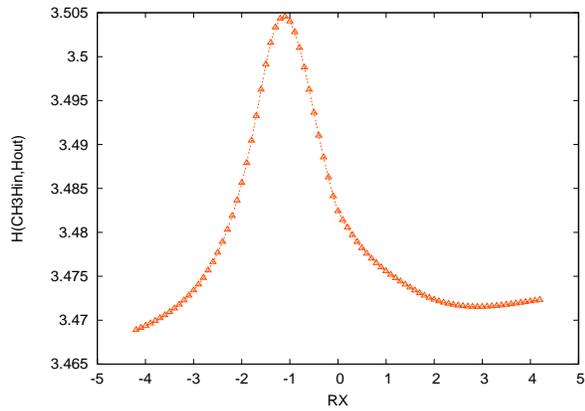
Figura 8.29: Comportamiento de las cargas de los subsistemas, en la reacción de desplazamiento S_N2 del metano. En donde $N_B = CH_3H_{in}^-$, y $N_A = H_{out}$.



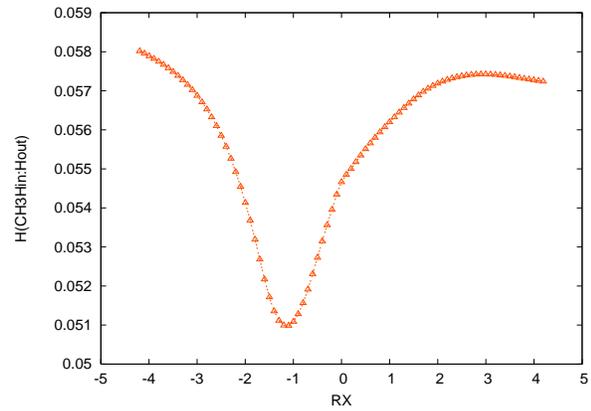
(a) Entropías condicionales.



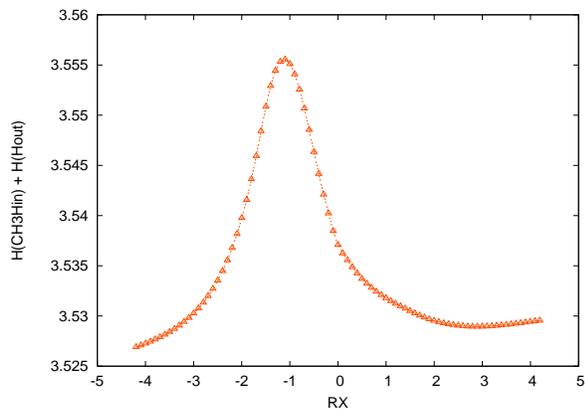
(b) Entropías de los subsistemas.



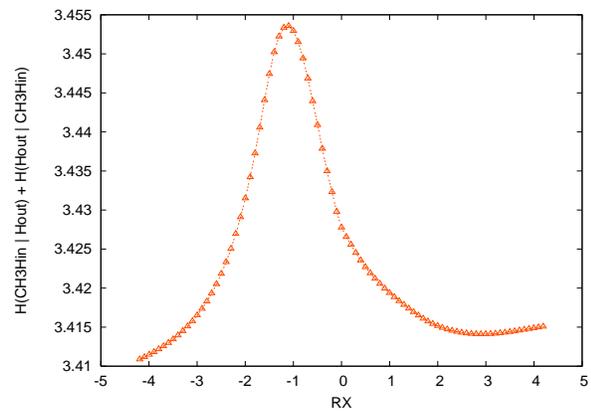
(c) Entropía conjunta.



(d) Información mutua.

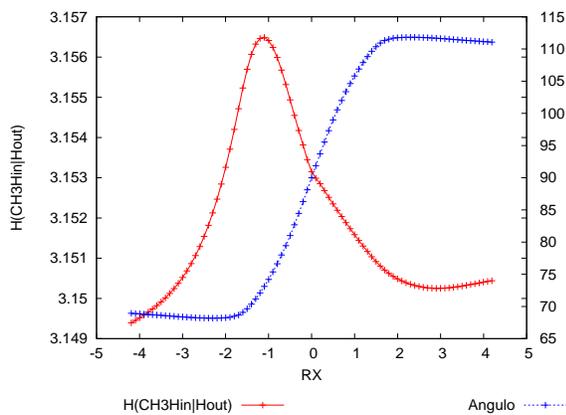


(e) Suma de las entropías de los subsistemas

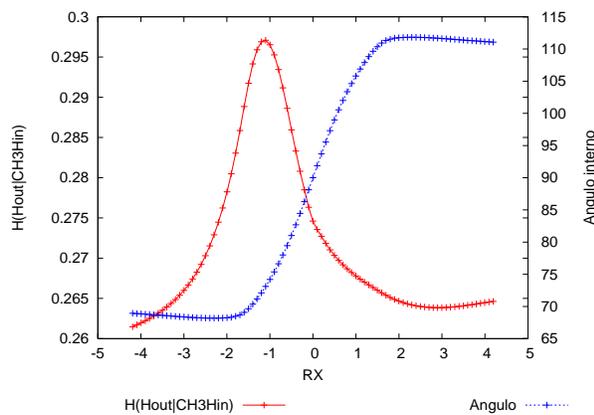


(f) Información no común

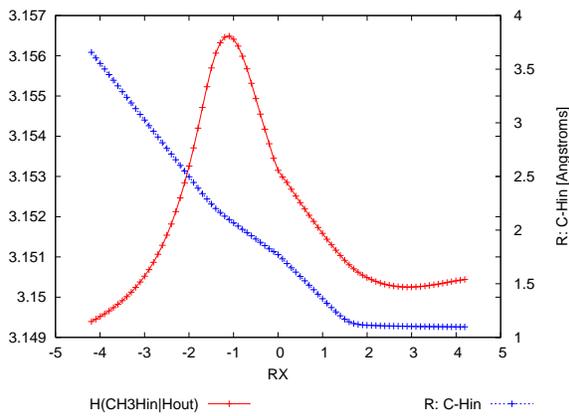
Figura 8.30: Tendencias de las entropías tipo H .



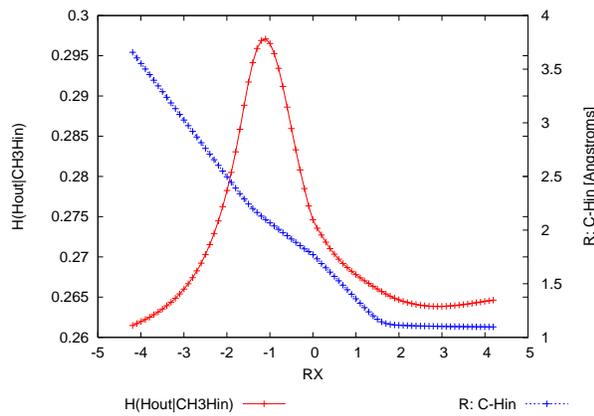
(a) $H(CH_3H_{in}^- | H_{out})$ vs el ángulo interno.



(b) $H(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$ vs el ángulo interno.



(c) $H(CH_3H_{in}^- | H_{out})$ vs $R : C - H_{out}$.



(d) $H(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$ vs $R : C - H_{out}$.

Figura 8.31: Comparación de las entropías condicionales con el ángulo interno y algunas distancias de enlace.

8.4.4. Resultados del condicionamiento $\{B\} = CH_3H_{in}^-$ y $\{A\} = H_{out}$: Entropías tipo R

A diferencia de las entropías tipo H , las entropías tipo R presentan una mejor estructura que coincide, como se ha mostrado anteriormente, con los cambios físicos y químicos característicos de este proceso. En la Figura (8.32(a)), se muestra la tendencia de la entropía condicional $R(CH_3H_{in}^- | H_{out})$ (ver la tendencia en color rojo de la Figura 8.32(a)) la cual presenta un máximo en $RX = -1.59810$ que corresponde a la zona del proceso de inversión de la configuración, que se puede comprobar al comparar la entropía $R(CH_3H_{out} | H_{in}^-)$ y la entropía $R(CH_3H_{in}^- | H_{out})$ con la variación del ángulo interno que se forma con los átomos que constituyen el metilo (ya que el proceso de la ruptura y formación del enlace $C-H$ es equivalente, por ello en $RX = 1.59810$ se observa un máximo en la entropía $R(CH_3H_{in}^- | H_{out})$) Figura (8.33). Asimismo, encontramos que al comparar, esta entropía con los cambios de la dureza y las frecuencias, Figura (8.34(d)) y con las distancias de los hidrógenos que participan en el proceso de ruptura y formación del enlace, Figuras (8.34(e)) y (8.34(f)), tenemos que los máximos de las tendencias de las entropías, delimitan la zona en la que los cambios físicos y químicos importantes ocurren en este proceso. Mientras que la entropía $R(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$, tendencia en azul de la Figura (8.32(a)), presenta una zona acotada por dos máximos en $RX = -0.99875$ y en $RX = 1.59810$ y dentro de dicha zona está presente un mínimo en $RX = 0.00000$ que corresponde al estado de transición, el primer máximo de esta tendencia lo hemos asociado al comienzo del proceso de abstracción lo cual, puede notarse al comparar la tendencias de la entropías $R(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$ y $R(H_{in}^- | CH_3H_{out}^-)$ con la tendencia del ángulo interno, ver la Figura (8.33).

En la Figura (8.32(b)) se muestran las tendencias de las entropías de los subsistemas, $R(CH_3H_{in}^-)$ y $R(H_{out})$, en el primer caso, tendencia en rojo, los puntos críticos de la entropía están relacionados con los siguientes parámetros:

Coordenada de reacción RX	Tipo de punto crítico	Parámetro con el que coincide
-1.99770	mínimo	distancia $C-H_{out}$
-1.39861	máximo	dureza
-0.69876	mínimo	momento dipolar
0.00000	máximo	energía, blandura, frecuencia
1.69784	mínimo	ángulo interno

Cuadro 8.3: Puntos críticos de la entropía $R(CH_3H_{in}^-)$. La comparación con los parámetros se muestra en la Figura (8.35).

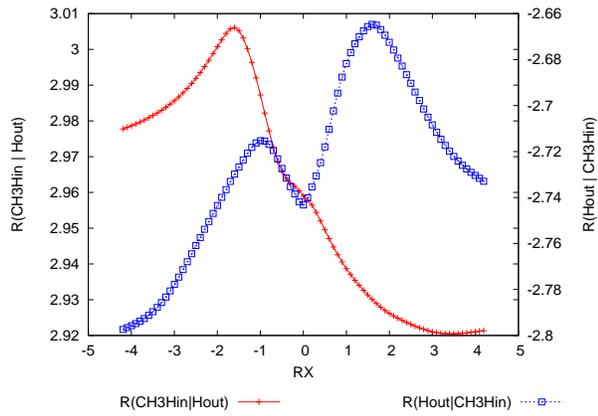
Mientras que la tendencia de entropía $R(H_{out})$ presenta puntos críticos en $RX = -1.99770, -0.49876, 0.00000$, que al comparar con las distancias $C-H_{in}^-$, $C-H_{out}$ y con el ángulo interno, Figura (8.36), encontramos que los mínimos situados en $RX = -1.99770$ y en $RX = 1.99770$ coinciden con el cambio de curvatura de las distancias y con el cambio de la curvatura de la tendencia del ángulo interno.

La entropía conjunta $R(CH_3H_{in}^-, H_{out})$ sólo presenta un punto máximo en $RX = -1.09874$, que se encuentra relacionado con el cambio en la curvatura de la tendencia de la distancia inter-

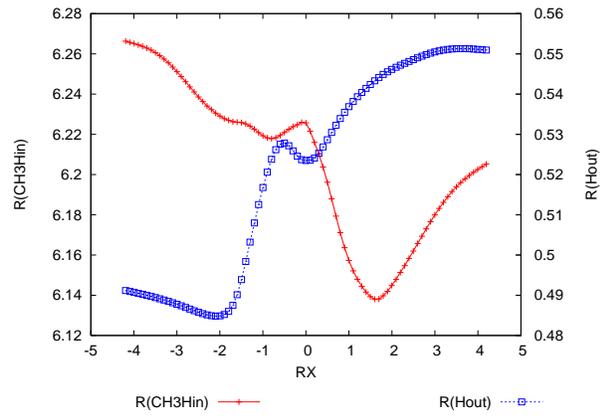
nuclear $C-H_{in}^-$ y con un cambio en la curvatura que presenta la tendencia del momento dipolar, Figura (8.37). Así mismo, en $RX = 0.00000$, esta entropía presenta un cambio en la curvatura, que está asociado al estado de transición. En el caso de la entropía mutua $R(CH_3H_{in}^- : H_{out})$, Figura (8.38), presenta un mínimo en $RX = -1.69784$, un máximo en el estado de transición, cuando $RX = 0.00000$, un mínimo en $RX = 1.59810$. Dado que en este caso, el proceso de ruptura del enlace es completamente equivalente al proceso de formación del enlace, es de esperarse que las entropías también manifiesten esta situación, y como se muestra en la Figura (8.38) la entropía $R(CH_3H_{out} : H_{in}^-)$ es una imagen especular de la entropía $R(CH_3H_{in}^- : H_{out})$. Ahora bien los mínimos en $RX = -1.69784$ y $RX = 1.69784$ de estas entropías corresponden con el punto con un cambio abrupto en la tendencia de la blandura, Figura (8.38(e)), y las diferencias entre los puntos mínimos de las entropías, pueden ser atribuidas a la manera en la que la estabilidad del sistema varía, por ejemplo, en el caso de $R(CH_3H_{in}^- : H_{out})$ que nos refleja la formación del enlace, uno de los subsistemas, H_{out} , cambia de un estado de máxima entropía a uno de mínima entropía, y lo mismo ocurre para el caso de la entropía $R(CH_3H_{out} : H_{in}^-)$, en el que el subsistema H_{in}^- cambia de un estado de mínima entropía (enlazado) a uno de máxima entropía (no enlazado). En el caso de la información no común, definida como la suma de las entropías condicionales, posee un comportamiento contrario a la información común, Figura (8.39).

Finalmente, en las Figuras (8.39(e)) y (8.39(f)), se presentan las tendencias del grado de entrelazamiento de este proceso, el cual se calculó como $\Lambda = R(A : B) - R(A, B)$ para los condicionamientos $\{A\} = H_{in}^-$, $\{B\} = CH_3H_{out}$ y $\{A\} = H_{out}$, $\{B\} = CH_3H_{in}^-$. En ambos casos, $\Lambda < 0$ por lo que el comportamiento clásico predomina sobre el cuántico a pesar de que $R(H_{in}^- | CH_3H_{out}) < 0$ y $R(H_{out} | CH_3H_{in}^-) < 0$. Ambas entropías presentan un par de mínimos, en $RX = -1.39861$ y en $RX = 1.49841$ para la entropía $R(H_{in}^- | CH_3H_{out})$ para los cuales $\Lambda_{RX=-1.39861} < \Lambda_{RX=1.49841}$ esto implica que en $\Lambda_{RX=1.49841}$ en este esquema de condicionamiento, los efectos cuánticos, como el entrelazado, son más importantes que en $\Lambda_{RX=-1.39861}$. Lo mismo ocurre con el segundo esquema de condicionamiento, en el que el grado de entrelazado, Λ , presenta un par de mínimos en $RX = -1.49841$ y $RX = 1.39861$ en los cuales $\Lambda_{RX=-1.49841} > \Lambda_{RX=1.39861}$, por ello concluimos que en ambos tipos de condicionamientos, los efectos de tipo cuántico como el entrelazado son importantes cuando los sistemas no se encuentran físicamente enlazados.

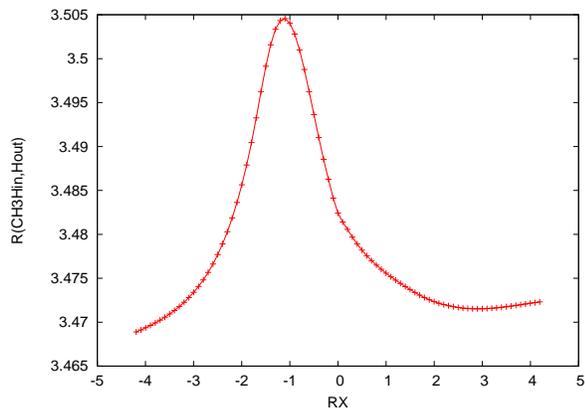
Finalmente, estas zonas definidas por este conjunto de mínimos, se encuentran vinculadas al proceso de ruptura y formación del enlace y concuerdan, también, con los cambios importantes en el ángulo interno, blandura, frecuencia y distancias de enlace, Figura (8.40).



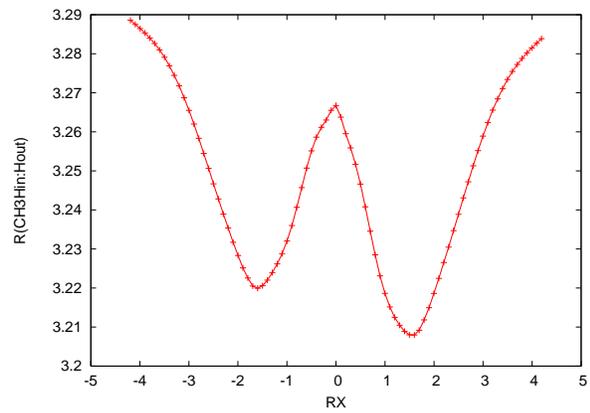
(a) Entropías condicionales.



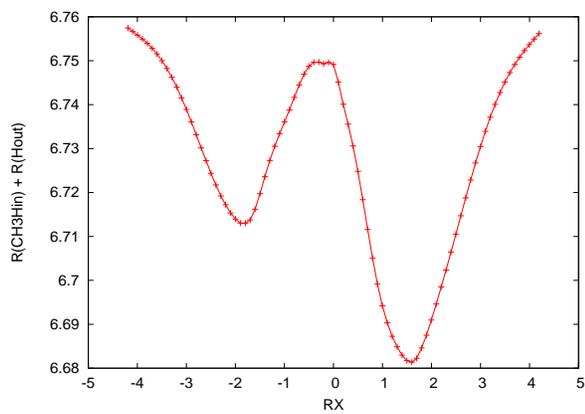
(b) Entropías de los subsistemas.



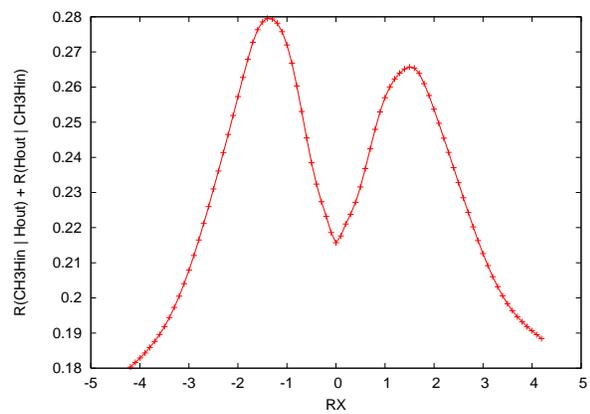
(c) Entropía conjunta.



(d) Información mutua.



(e) Suma de las entropías de los subsistemas.



(f) Información no común.

Figura 8.32: Tendencias de las entropías tipo R .

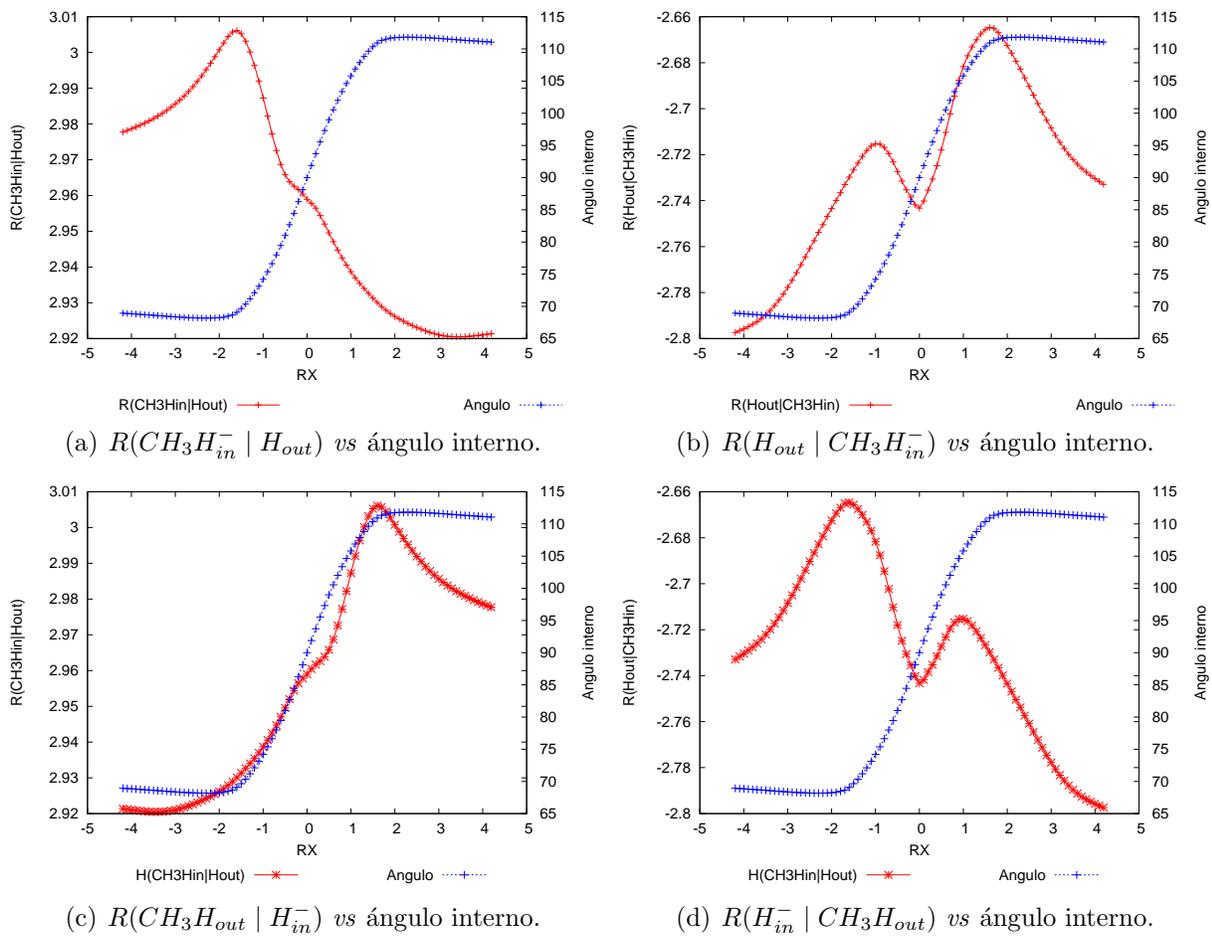
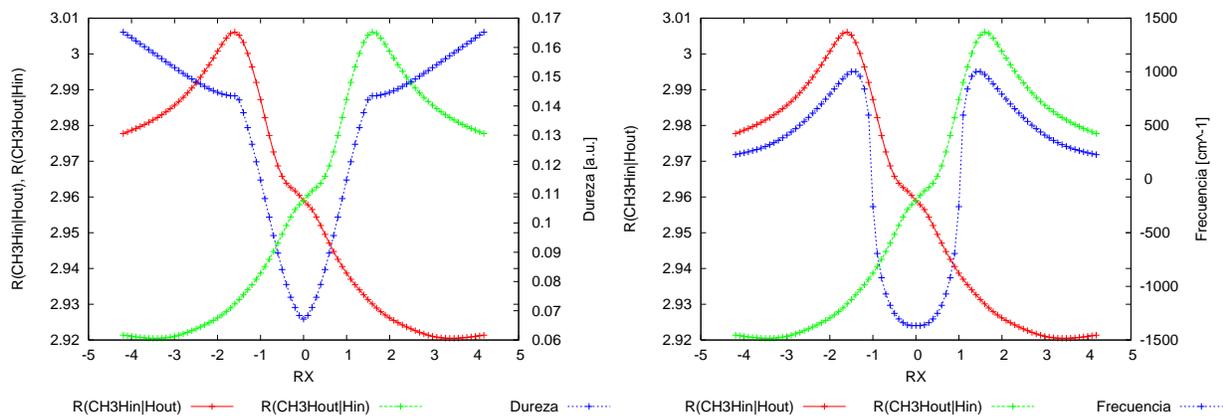
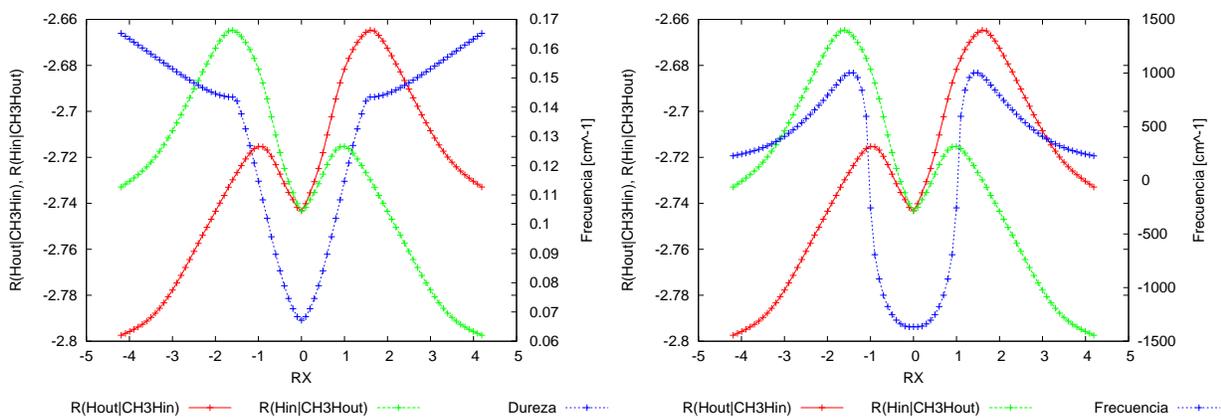


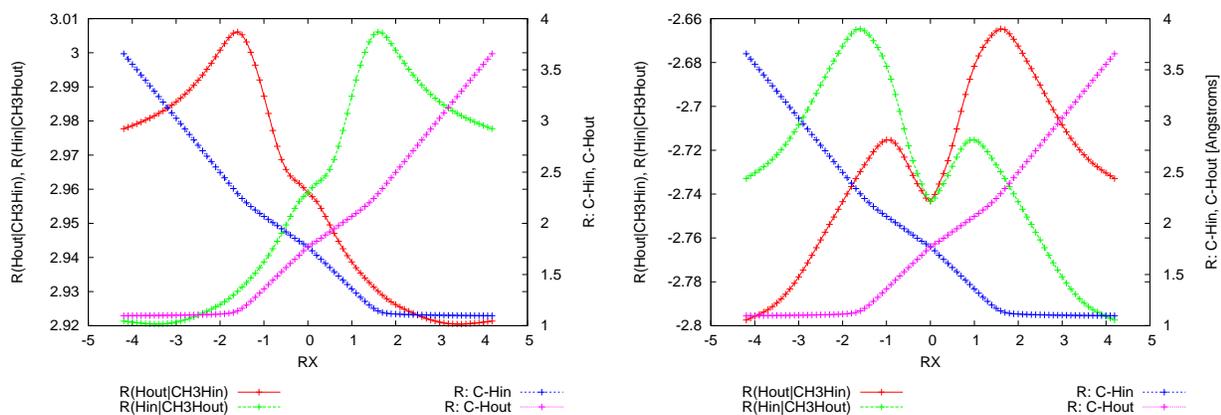
Figura 8.33: Comparación de las entropías condicionales tipo R con el ángulo interno.



(a) $R(CH_3H_{in}^- | H_{out})$ y $R(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$ vs dureza. (b) $R(CH_3H_{in}^- | H_{out})$ y $R(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$ vs frecuencias.

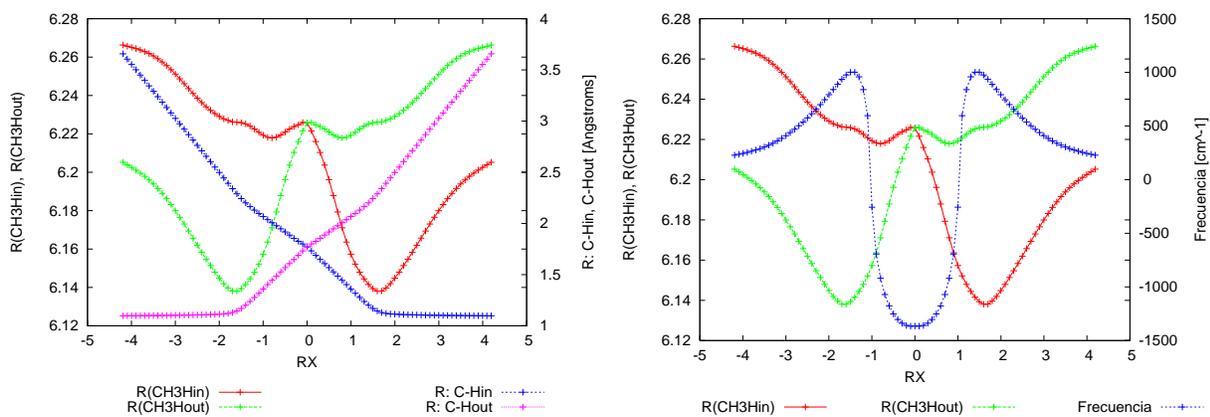


(c) $R(CH_3H_{in}^- | H_{out})$ y $R(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$ vs dureza. (d) $R(CH_3H_{in}^- | H_{out})$ y $R(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$ vs frecuencias.



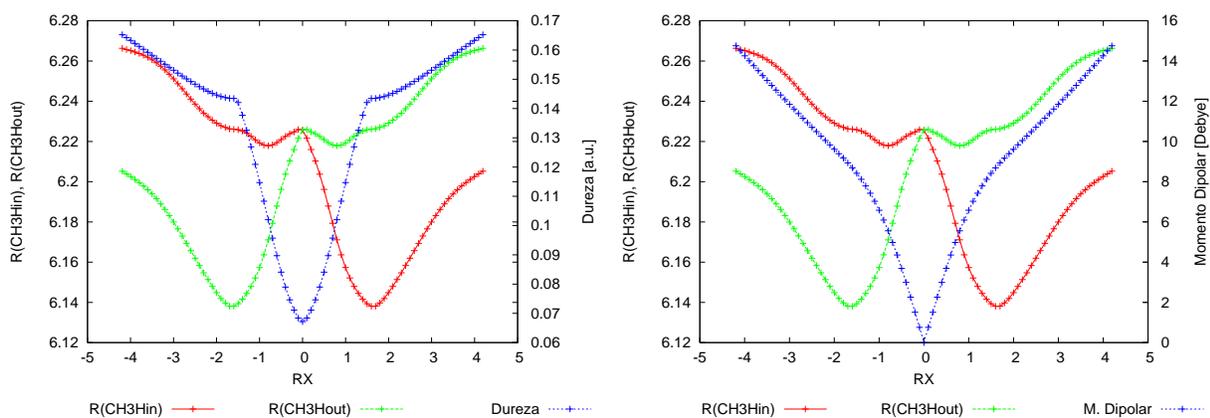
(e) $R(CH_3H_{in}^- | H_{out})$ y $R(CH_3H_{out} | H_{in})$ vs las distancias $C-H_{in}^-$ y $C-H_{out}$. (f) $R(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$ y $R(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$ vs las distancias $C-H_{in}^-$ y $C-H_{out}$.

Figura 8.34: Comparación de las entropías condicionales tipo R con la dureza, las frecuencias y las distancias.



(a) $R(\text{CH}_3\text{H}_{in}^-)$ y $R(\text{CH}_3\text{H}_{out})$ vs $R: \text{C} - \text{H}_{in}^-$, $\text{C} - \text{H}_{out}$.

(b) $R(\text{CH}_3\text{H}_{in}^-)$ y $R(\text{CH}_3\text{H}_{out})$ vs Frecuencia.



(c) $R(\text{CH}_3\text{H}_{in}^-)$ y $R(\text{CH}_3\text{H}_{out})$ vs Dureza.

(d) $R(\text{CH}_3\text{H}_{in}^-)$ y $R(\text{CH}_3\text{H}_{out})$ vs Momento dipolar.

Figura 8.35: Comparación de la entropías tipo R de los subsistemas.

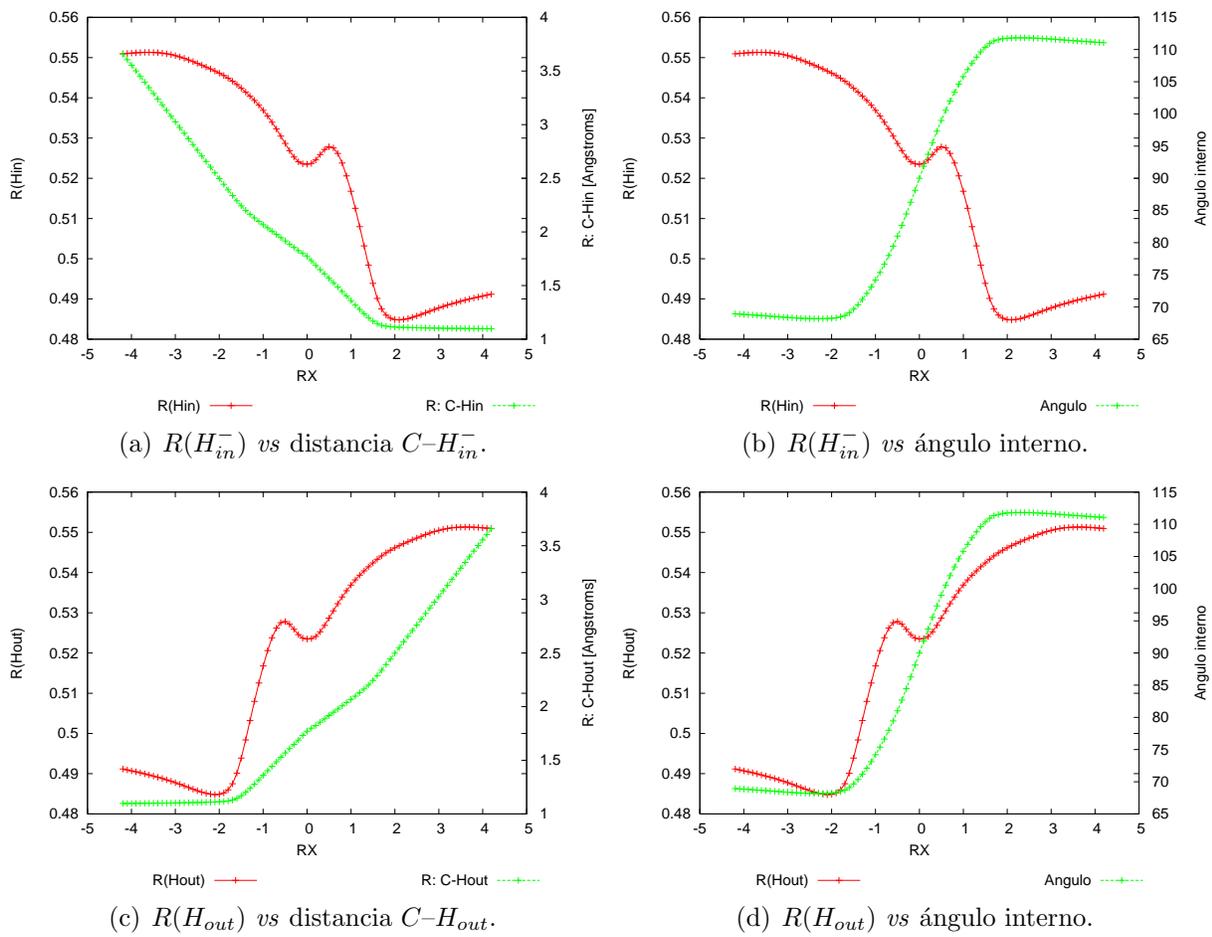


Figura 8.36: Comparación de la entropías tipo R de los subsistemas.

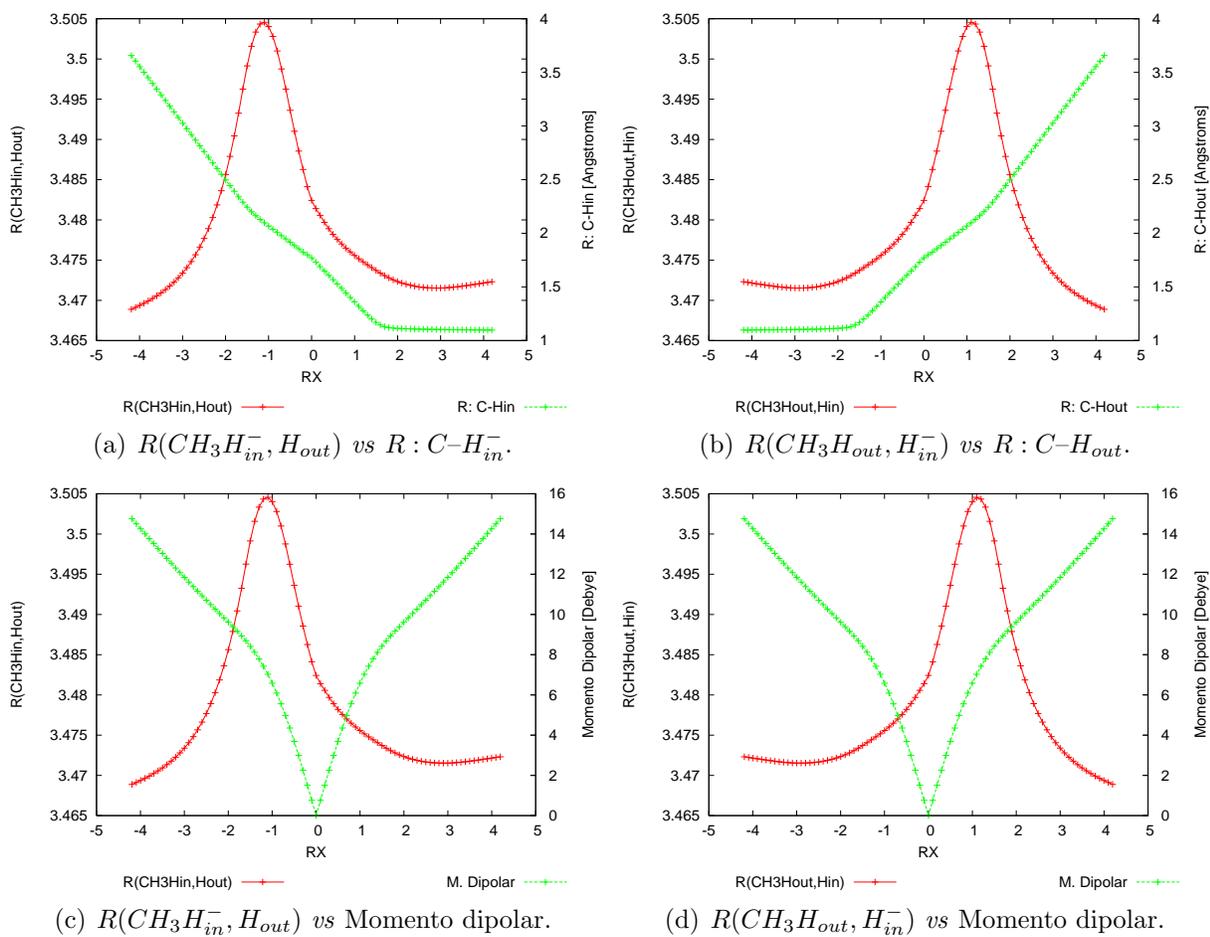


Figura 8.37: Comparación de la entropía conjunta con las distancias y el Momento dipolar.

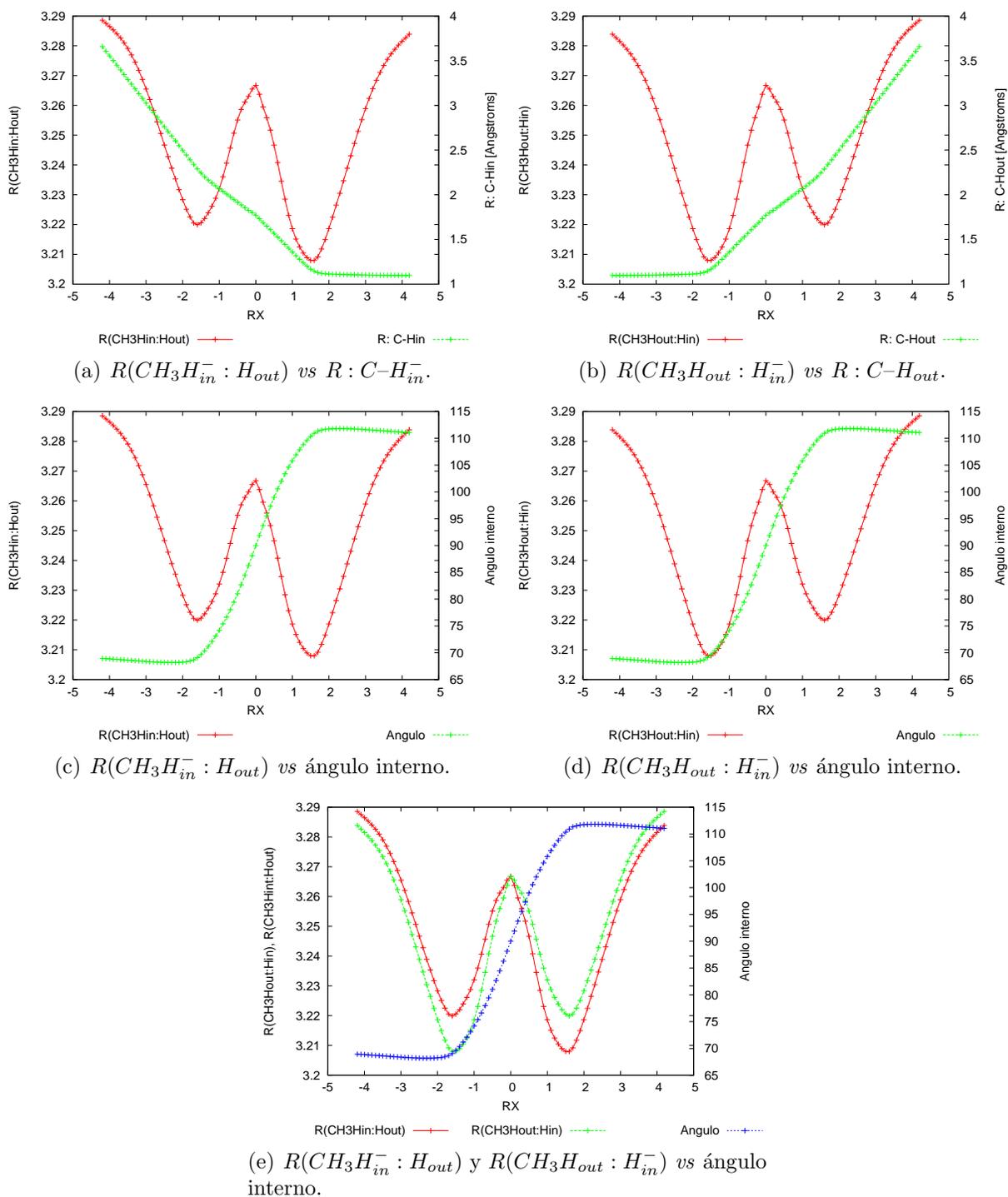
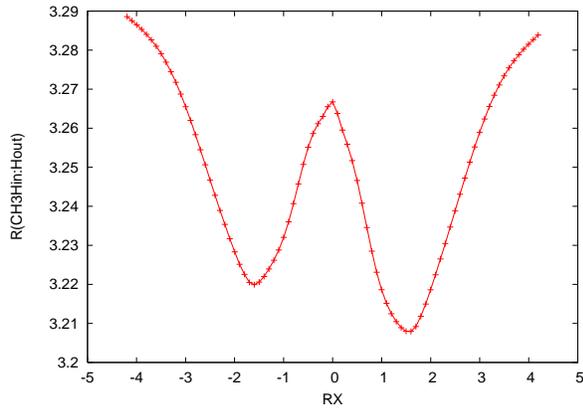
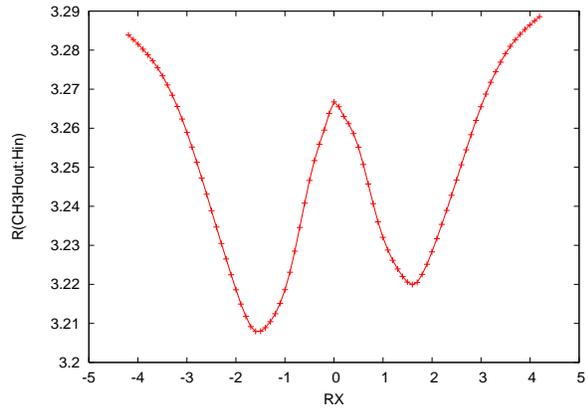


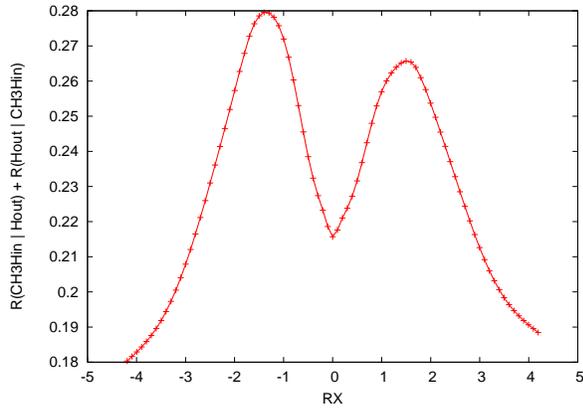
Figura 8.38: Comparación de las entropías tipo R con las distancias y el ángulo interno



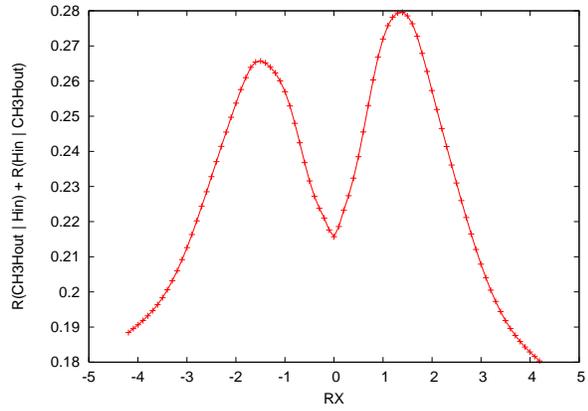
(a) $R(CH_3H_{in}^- : H_{out})$



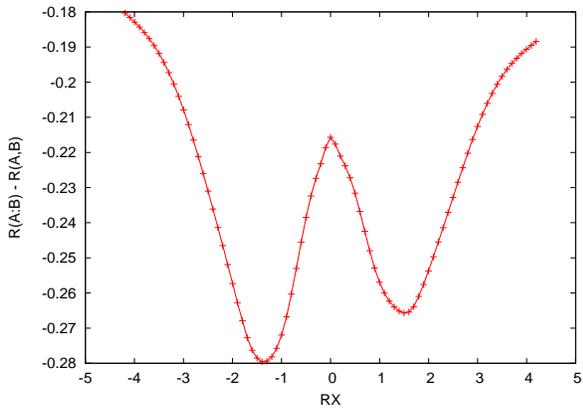
(b) $R(CH_3H_{out} : H_{in}^-)$



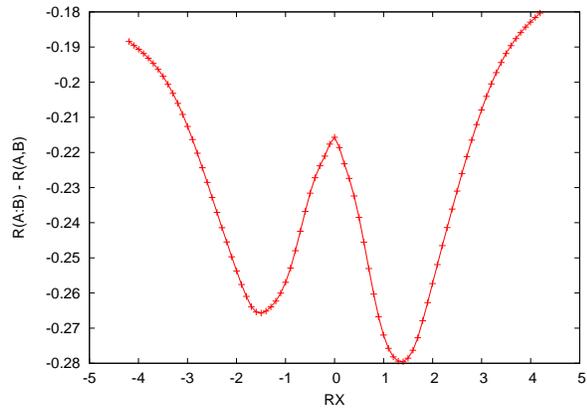
(c) $R(CH_3H_{in}^- | H_{out}) + R(H_{out} | CH_3H_{in}^-)$



(d) $R(CH_3H_{out} | H_{in}^-) + R(H_{in}^- | CH_3H_{out})$



(e) Λ , con los subsistemas $\{B\} = CH_3H_{in}^-$ y $\{A\} = H_{out}$.



(f) Λ , con los subsistemas $\{B\} = CH_3H_{out}$ y $\{A\} = H_{in}^-$.

Figura 8.39: Tendencias de la información común, no común y el grado de entrelazado.

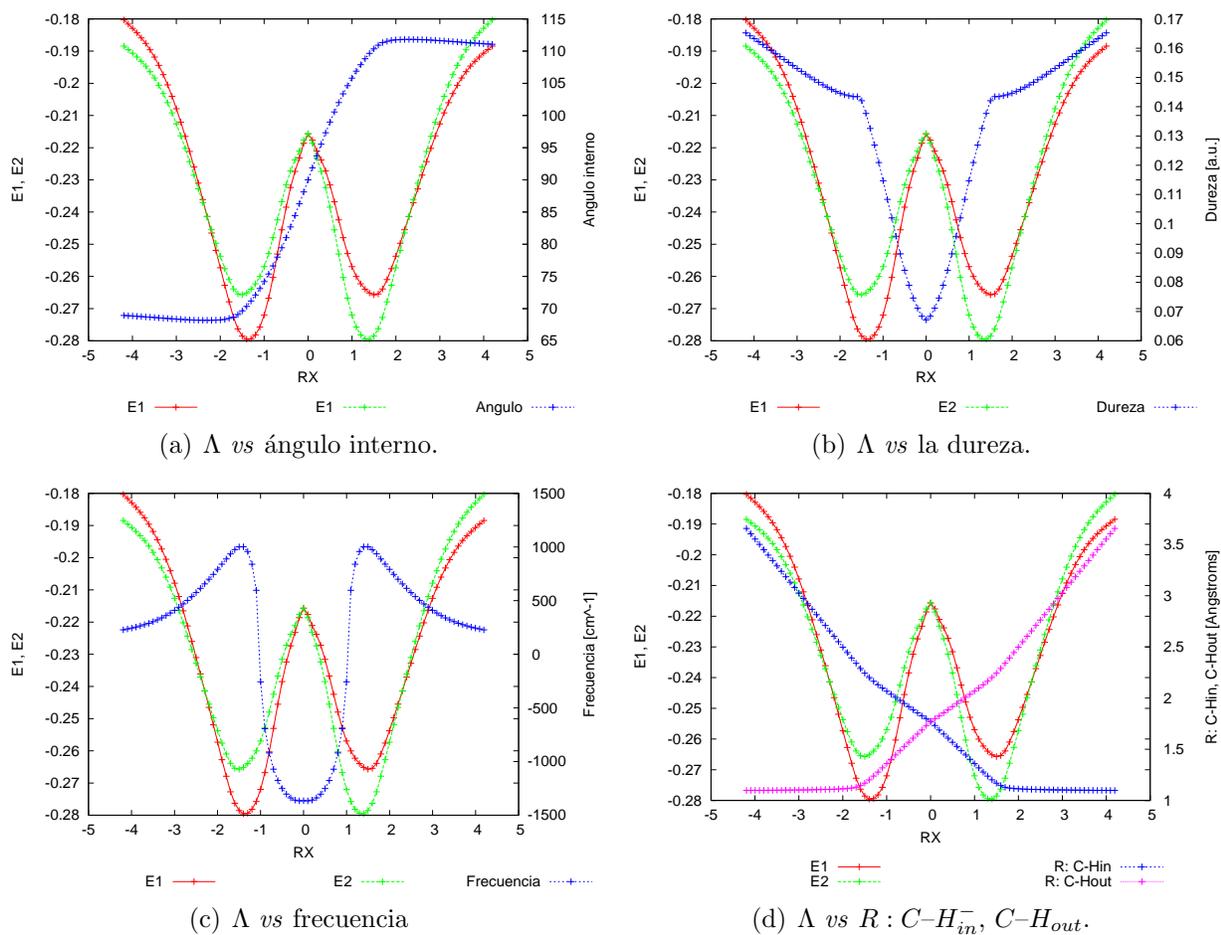


Figura 8.40: Comparación del grado de entrelazado $\Lambda = R(A : B) - R(A, B)$ con diferentes parámetros. $E1 = R(CH_3H_{in}^- : H_{out}) - R(CH_3H_{in}^-, H_{out})$ y $E2 = R(CH_3H_{out} : H_{in}^-) - R(CH_3H_{out}, H_{in}^-)$.

8.5. Reacción S_N2 : $H^- + CH_4 \longrightarrow CH_4 + H^-$: Medidas de información clásicas y complejidad

Puesto que la complejidad exige mucha información para ser analizada, se puede considerar de manera intuitiva que se puede evaluar la complejidad a través de una medida de información. Este es el camino que se ha seguido para evaluar la complejidad de sistemas químicos y físicos sencillos (básicamente átomos [6, 75, 91, 108]), en la presente sección, se muestran los resultados de la aplicación de las medidas de complejidad, Ecs. (3.1–3.21), definidas en el capítulo 3, pág. 15, aplicados por primera vez en procesos químicos.

Para calcular todos los parámetros de complejidad, se utilizó un programa de integración en 3D, hecho por José M. Pérez-Jordá y Axel D. Becke [94] y un programa hecho por M. Kohout [57] para generar la densidad y el gradiente de densidad en espacio de posiciones y momentos. Para el cálculo de las entropías informacionales clásicas y de los parámetros de complejidad se creó una interfaz de comunicación entre ambos programas, lo que nos ha permitido caracterizar sistemas de interés nanotecnológico de poco más de 4500 átomos [34] y procesos químicos empleando las entropías de Shannon [35], Fisher y los descriptores de complejidad que se derivan de estas medidas de información.

El sistema de estudio fue la reacción $H^- + CH_4 \longrightarrow CH_4 + H^-$, de la cual se utilizaron los datos geométricos del estado de transición obtenido por Shi y Boyd [111], el IRC se calculó con el método MP2 y la base 6-311G en Gaussian 03 [37] y para cada punto de la trayectoria de reacción se calculó la densidad electrónica en espacio de posiciones y momentos.

Desde las primeras aplicaciones de la Teoría de la Información dentro de la Química Teórica, sólo hay un trabajo en el que se han mostrado resultados concernientes a reacciones químicas empleando las entropías de Shannon [44], del cual, las tendencias de las entropías de Shannon no fue convincente, esto se debió fundamentalmente a que sólo calcularon diez puntos de toda la trayectoria de reacción y como se ha mostrado a lo largo del presente trabajo todas las entropías informacionales son extremadamente sensibles.

En las Figuras (8.41(a)) y (8.41(b)) se muestran las tendencias de las entropías de Shannon. En la Figura (8.41(a)) se muestran las tendencias de las entropías de Shannon en espacio de posiciones y en espacio de momentos, las cuales han sido interpretadas como una medida de la deslocalización electrónica. Los puntos críticos de las tendencias de las entropías se resumen en el cuadro (8.4).

Entropía	Coordenada de reacción	Tipo de punto crítico	Entropía	Coordenada de reacción	Tipo de punto crítico
$S_{\vec{r}}$	-1.69784	Mínimo	$S_{\vec{p}}$	-1.69784	Máximo
	-0.69876	Punto de inflexión		-0.59876	Punto de inflexión
	-0.29877	Punto de inflexión		0.00000	Mínimo
	0.00000	Máximo		0.59876	Punto de inflexión
	0.29877	Punto de inflexión		-1.69784	Máximo
	0.69876	Punto de inflexión			
	1.69784	Mínimo			

Cuadro 8.4: Puntos críticos de las entropías de Shannon en espacio de posiciones y momentos.

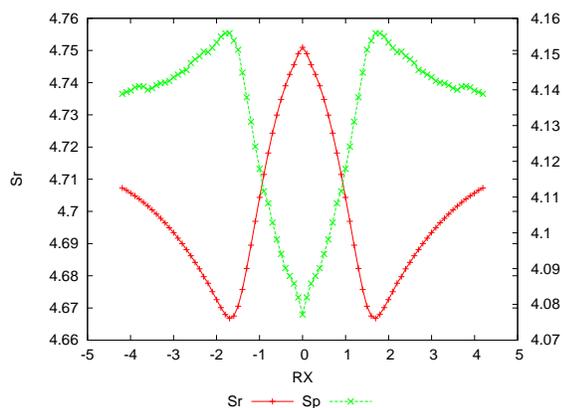
Las entropías de Shannon y los descriptores de complejidad tienen una estructura muy similar a la de las entropías discretas obtenidas con el mismo método y la misma base. En las Figuras (8.41) y (8.42) se muestran las comparaciones de estas entropías con las distancias de ruptura y formación de enlace, la variación del ángulo interno, dureza, blandura, frecuencia y momento dipolar. Estos parámetros, también presentan valores mínimos o máximos en $RX = -1.69784$ y en $RX = 1.69784$, de los cuales se muestran algunas de las isosuperficies del potencial electrostático molecular, Figura (8.43), del intervalo $-1.69784 \leq RX \leq 0.00000$, que corresponde a la zona del proceso de inversión de la configuración hasta llegar al estado de transición.

Asimismo, hay una relación entre las entropías de Shannon en espacio de posiciones y momentos similar a la reacción entre la dureza y la blandura (una es la imagen especular de la otra), ver las Figuras (8.42a) y (8.42b). Por ello, tenemos que las entropías continuas también se encuentran relacionadas a la reactividad química.

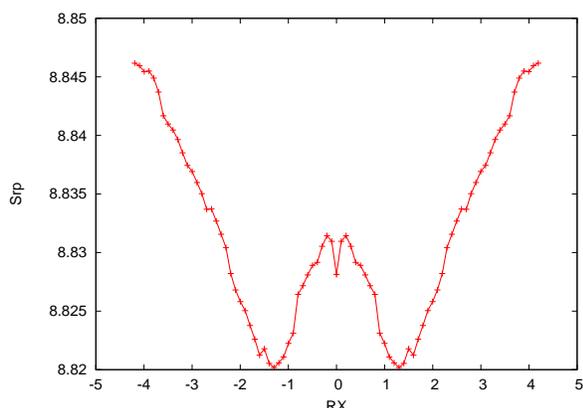
Tanto las entropías como los parámetros de complejidad, presentan estructuras similares. Por tal motivo solo se hace la comparación de las tendencias de las entropías de Shannon con: las distancias internucleares $C-H_{in}^-$ y $C-H_{out}$, el ángulo interno, la dureza y la frecuencia. En el cuadro (8.5), se muestran cuales fueron las tendencias que resultaron equivalentes, las cuales se muestran en la Figuras (8.44) y (8.45),

Grupo I	Grupo II
$C_{\vec{r}}, C_{\vec{r}\vec{p}}$	
$D_{\vec{p}}, D_{\vec{r}\vec{p}}$	
$E_{\vec{r}}$	$E_{\vec{p}}$
$F_{\vec{r}}, F_{\vec{r}\vec{p}}$	
$I_{\vec{r}}, I_{\vec{p}}, I_{\vec{r}\vec{p}}$	
$J_{\vec{r}}$	$J_{\vec{p}}$
$P_{\vec{r}}, P_{\vec{p}}, P_{\vec{r}\vec{p}}$	
$S_{\vec{r}}$	$S_{\vec{p}}$

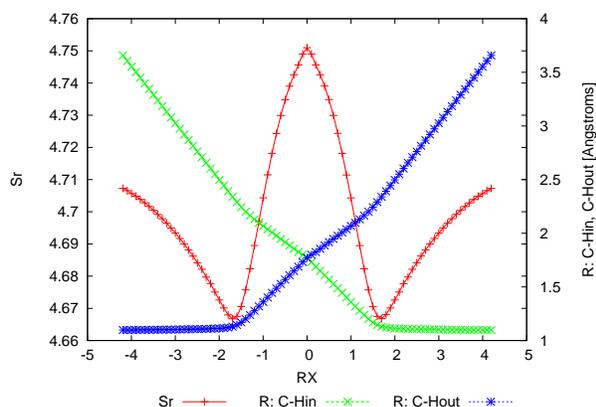
Cuadro 8.5: Parámetros que presentan el mismo tipo de estructura.



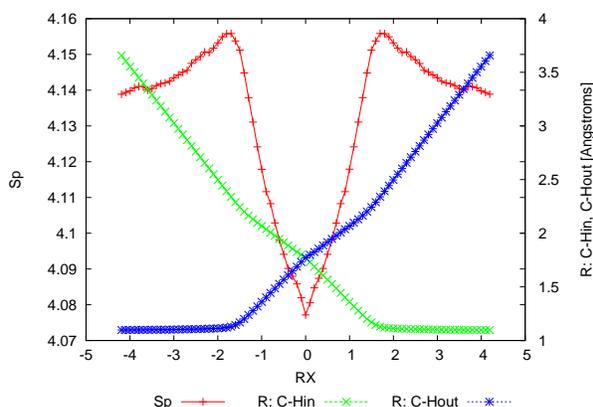
(a) $S_{\vec{r}}$ vs $S_{\vec{p}}$.



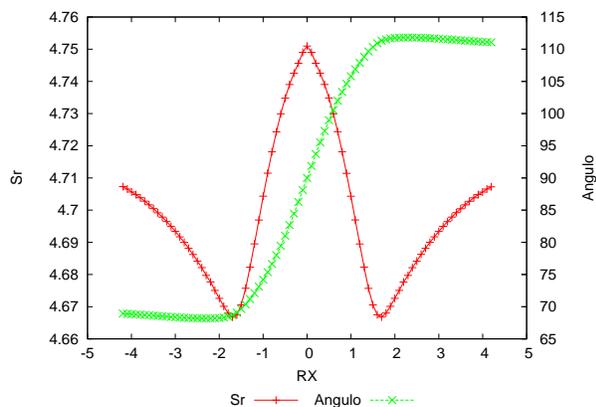
(b) $S_{\vec{r}\vec{p}}$.



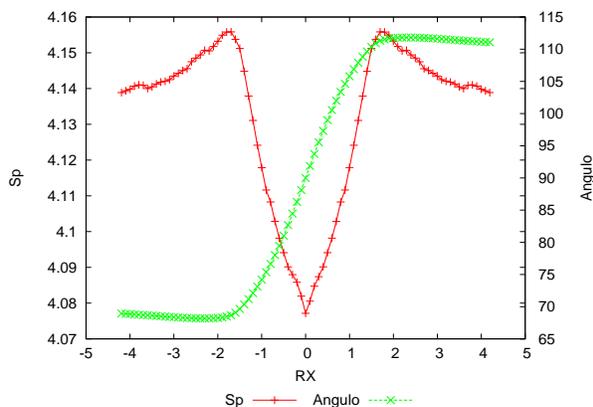
(c) $S_{\vec{r}}$ vs $R : C - H_{in}, C - H_{out}$.



(d) $S_{\vec{p}}$ vs $R : C - H_{in}, C - H_{out}$.

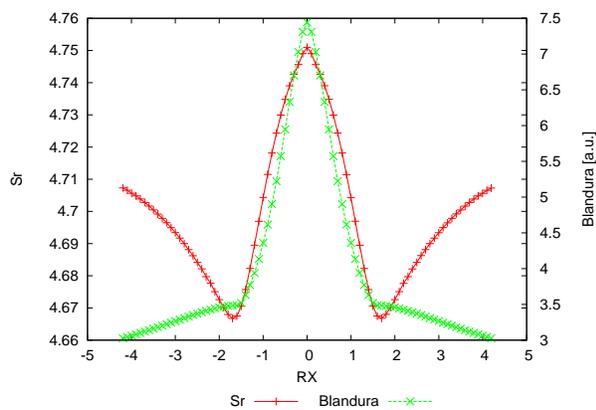


(e) $S_{\vec{r}}$ vs ángulo interno.

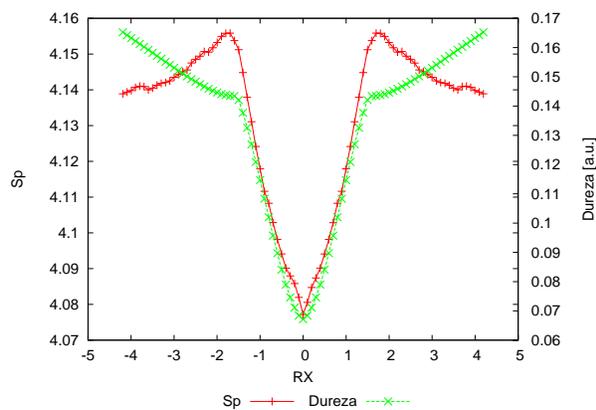


(f) $S_{\vec{p}}$ vs ángulo interno.

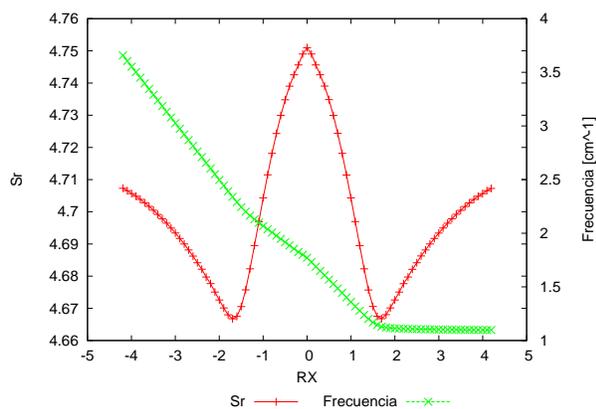
Figura 8.41: Comparación de las entropías de Shannon en espacio de posiciones y momentos con la variación de algunos parámetros geométricos.



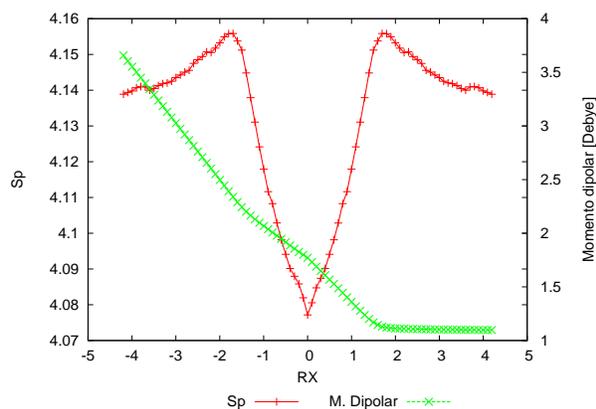
(a) $S_{\vec{r}}$ vs blandura.



(b) $S_{\vec{p}}$ vs dureza.



(c) $S_{\vec{r}}$ vs frecuencia.



(d) $S_{\vec{p}}$ vs momento dipolar.

Figura 8.42: Comparación de las entropías de Shannon en espacio de posiciones y momentos con la dureza, blandura, frecuencia y momento dipolar.

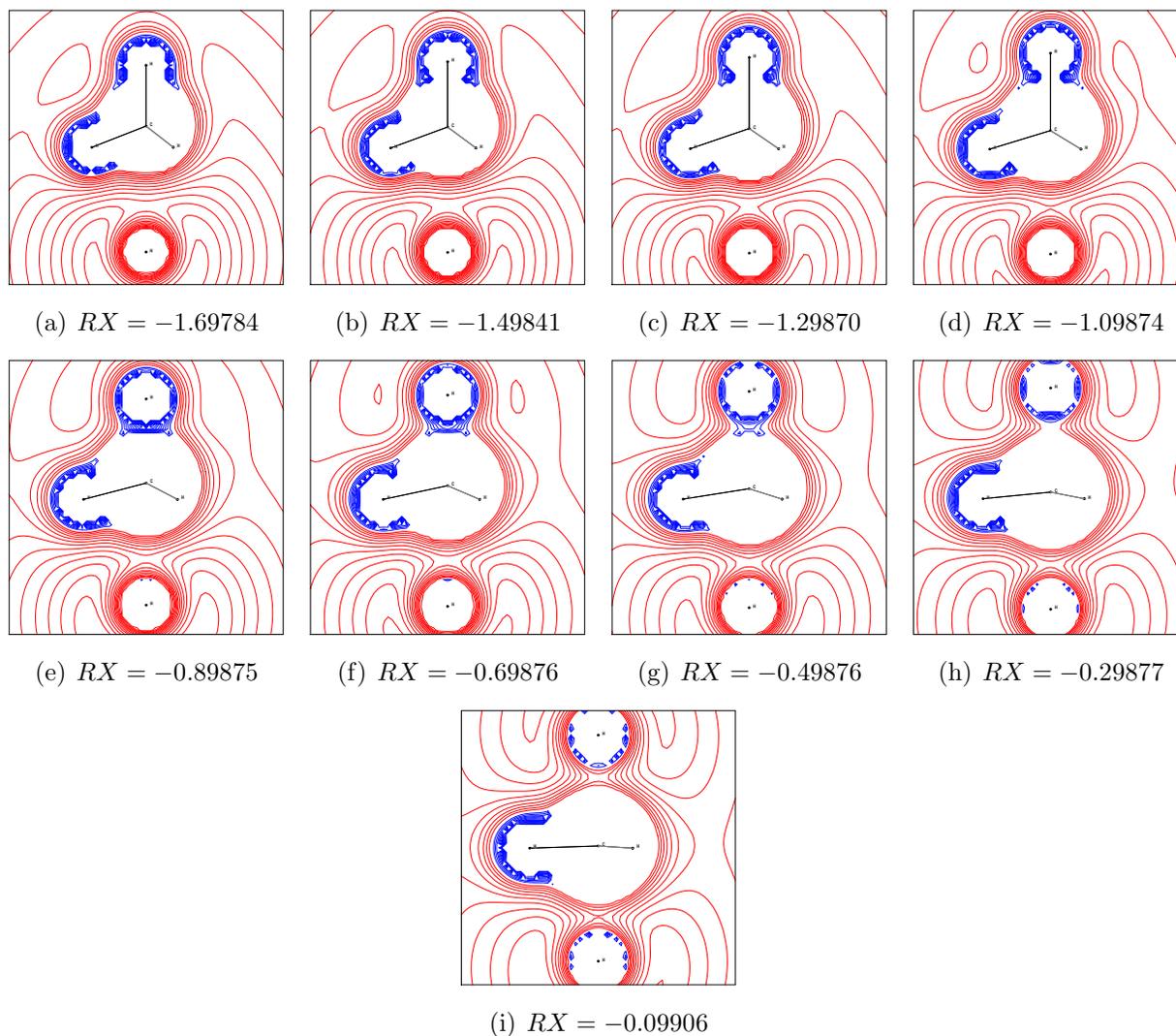


Figura 8.43: Isosuperficies del potencial electrostático molecular correspondientes a los puntos críticos de las tendencias de las entropías de Shannon mostradas en las Figuras (8.41) y (8.42), los cuales concuerdan con los puntos críticos de los descriptores de complejidad mostrados en la Figura (8.44) y (8.45).

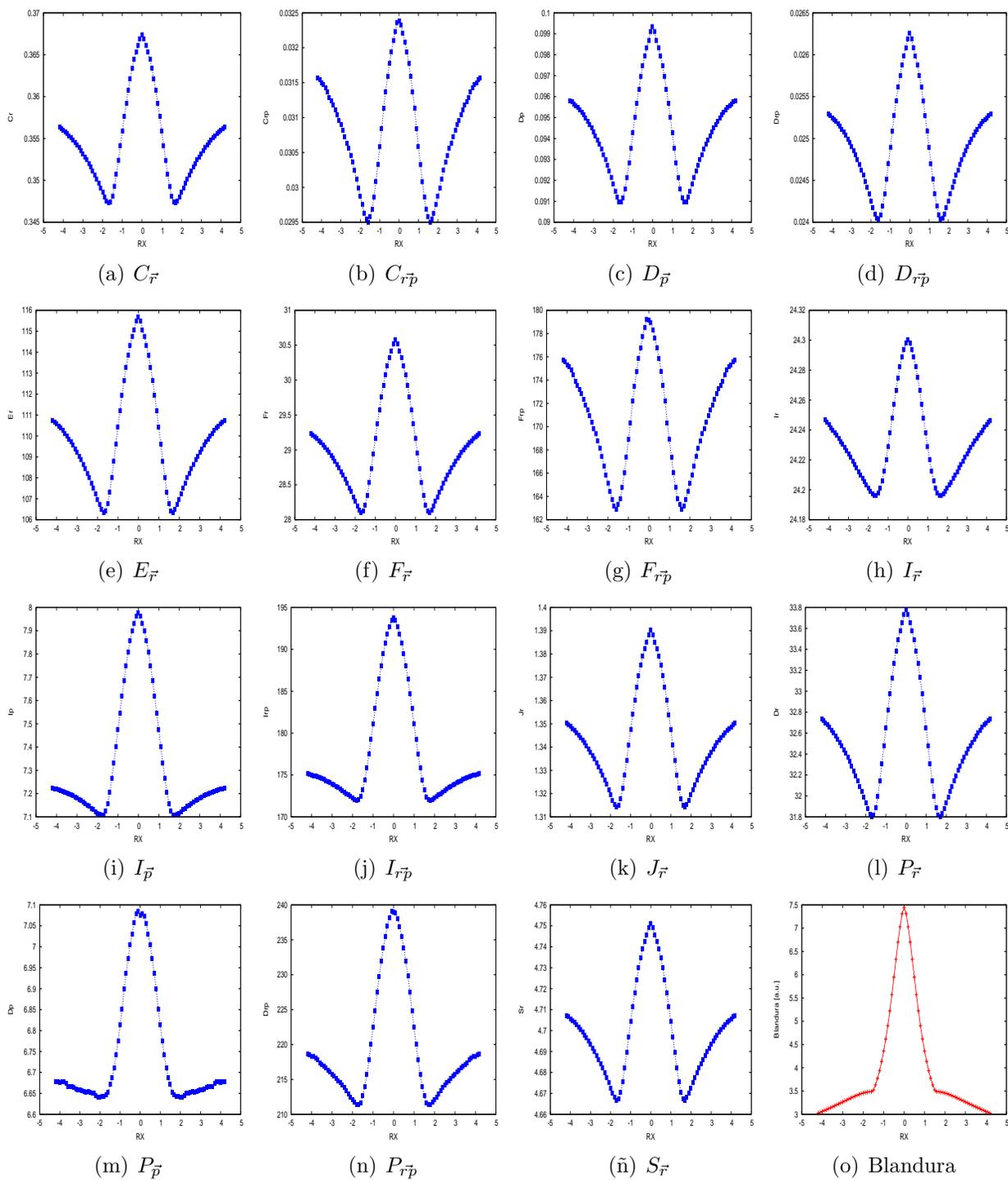


Figura 8.44: Comportamiento general de las entropías informacionales continuas y los parámetros de complejidad. Grupo I.

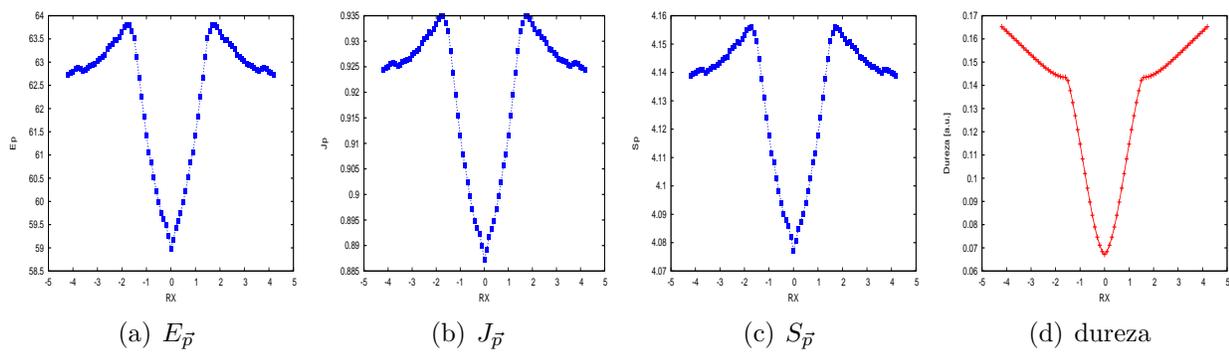


Figura 8.45: Comportamiento general de las entropías informacionales continuas y los parámetros de complejidad. Grupo II.

Capítulo 9

Conclusiones

Uno de los propósitos generales de esta Tesis, ha sido tratar de que enriquecer el lenguaje de la química con conceptos fundamentados en la Mecánica Cuántica y la Teoría Cuántica de la Información con ello se pretende lograr una nueva interpretación de las propiedades físicas de los procesos y sistemas químicos de tal forma que el concepto principal sea una entidad abstracta que es la información. Para ello es necesario preservar la capacidad de manipular estados entrelazados los cuales son una característica distintiva de la Mecánica Cuántica de forma que un sistema cuántico aislado que evoluciona preserve las superposiciones en un espacio de Hilbert, de esta manera las observaciones del comportamiento de la materia a través de la Química ya no son exclusivamente en términos de la Mecánica Cuántica, sino que también son las consecuencias de restricciones ligadas a la adquisición, representación y transmisión de la información.

Como se ha mostrado a lo largo de la presente Tesis, muchos de los aspectos físicos de los sistemas, tales como la remoción y acumulación de carga, los cambios geométricos, los cambios en la dureza, la blandura, las frecuencias y muchos otros, tienen una interpretación informacional, de manera que el comportamiento y los vínculos entre tales conceptos del lenguaje químico especializado son enteramente naturales cuando se les aborda en términos de información.

Particularmente, con los ejemplos presentados en esta Tesis se ha mostrado que con este nuevo esquema de pensamiento y con ayuda de las entropías marginales y no marginales se puede describir a los sistemas y procesos químicos en términos de la información, la cual al ser interpretada encontramos que tiene realidad física o química y es tan general que nos lleva a preguntarnos si la información es el concepto que subyace a todas las ciencias y con ello aceptar la gran generalidad del concepto mismo.

Finalmente, podemos destacar las siguientes conclusiones particulares:

1. Se introduce el lenguaje de la Teoría de Información Cuántica en Química.
2. Se introduce en la teoría de medidas de información el uso de entropías no marginales, que son capaces de medir entrelazado.
3. La definición de la probabilidad conjunta como $\frac{P_i(A)+P_j(B)}{n+m}$, nos permitió preservar las relaciones clásicas de la Teoría de Información y las relaciones de balance al definir las entropías de von Neumann marginales y no marginales.

4. Las medidas informacionales tipo R , principalmente la entropía mutua, tienen la ventaja de poder describir el comportamiento discutido en la literatura acerca de la probabilidad cuántica; es decir, negatividad, correlación, y supercorrelación que en apariencia violan los principios tales como “realismo” y “localidad”.
5. La negatividad de las entropías condicionales es un comportamiento general de los sistemas cuánticamente correlacionados más no un requisito. Dicha negatividad se ha interpretado como el potencial para adquirir información [23, 28, 47]. Asimismo, por primera vez se obtuvo la medida de la potencialidad de la información (a través de las entropías condicionales negativas) en sistemas moleculares.
6. El entrelazado de un sistema químico puede ser empleado para caracterizarlo, ya que esta super correlación es a nivel de la función de onda y es independiente de los métodos de análisis [46].
7. Encontramos que las correlaciones cuánticas de los sistemas no cambian con los métodos de estructura electrónica empleados y son independientes de los aspectos reduccionistas de los mismos. También, el entrelazado nos muestra que la correlación química entre los átomos de estos sistemas es prácticamente independiente de los métodos. Por tanto, dicha propiedad puede ser considerada como una medida global para caracterizar los sistemas sin importar el tipo de método empleado.
8. En términos informacionales, es natural que la información común $R(A : B)$, se comporte de manera contraria a la información no común, $R(A | B) + R(B | A)$, al igual que es natural que la dureza se comporte de manera contraria a la blandura. Así, en este caso mostramos que el comportamiento general de algunos descriptores puede ser explicado mediante el comportamiento general de la información.
9. Para el caso de los procesos químicos se definió el grado de entrelazado, Λ , que nos permite establecer si un sistema puede presentar un comportamiento de tipo cuántico o clásico. En función del nivel de correlación, dependiendo si el sistema en cuestión está total o parcialmente correlacionado.
10. Hemos encontrado algunos de los elementos del bloque s de la tabla periódica presentan entrelazado cuando se someten a procesos de disociación. Sin embargo no fue posible determinar si el entrelazado está relacionado con alguna propiedad periódica de los sistemas.
11. La entropía conjunta puede ser clasificada como una medida de entrelazado, la cual cumple todas las propiedades reportadas en la literatura [116].
12. En los procesos químicos, las entropías tipo R se pueden vincular a la correlación cuántica de los sistemas, mientras que las entropías tipo H están estrechamente relacionadas a la correlación clásica de los sistemas.
13. La información mutua (información común) tipo R siempre es mayor que cero, por tanto, es de esperarse que todo sistema químico esté correlacionado cuánticamente aunque clásicamente no lo este. Así, $R(B : A)$, también, puede ser considerada como una medida de la supercorrelación del sistema y $H(B : A)$ como una medida de la correlación más fina, como por ejemplo, la correlación coulombica.

14. Las entropías marginales y no marginales varían acorde a los parámetros químicos y físicos como el momento dipolar, las frecuencias, parámetros geométricos, dureza y blandura. De igual manera, ambos esquemas reflejan el proceso de ruptura y formación de los enlaces.
15. Las medidas clásicas de la información son extremadamente sensibles, y están relacionadas con los cambios físicos y químicos de los sistemas, sin embargo, las tendencias obtenidas son prácticamente equivalentes y no nos brindan información diferente a la que puede ser obtenida con los descriptores de reactividad química.
16. Pese a que las entropías clásicas y los parámetros de complejidad presentan una excelente calidad en las tendencias obtenidas de los procesos analizados y su vínculo con la reactividad química de los sistemas es evidente, el costo computacional que este tipo de cantidades tiene, las hace poco viables en su utilización para caracterizar sistemas de mayor tamaño, y en general se suele requerir de técnicas de supercómputo para llevar a cabo los cálculos en un tiempo razonable [33, 34].
17. Las entropías informacionales cuánticas y clásicas están estrechamente relacionadas a los siguientes parámetros: dureza, blandura, las frecuencias de los modos normales de vibración más importantes, la energía de correlación, la variación de las cargas, la variación de los parámetros geométricos, el momento dipolar, entre otros.
18. Se mostró que con las entropías definidas en el espacio de Hilbert se obtiene una descripción de los procesos superior a las entropías clásicas, por ello, dichas entropías pueden ser empleadas como descriptores de complejidad.

Capítulo 10

Perspectivas

Para continuar y extender la línea de investigación de este proyecto se pretende:

1. Establecer formalmente si las entropías tipo H (marginales) pueden ser empleadas como una medida del entrelazado de destilación o de la separabilidad de los sistemas, asimismo determinar si las entropías tipo R (no marginales) pueden ser empleadas como medidas del entrelazado de formación. Para ello es necesario ahondar en el estudio formal del comportamiento cuántico de los sistemas.
2. Extender los estudios de la complejidad de los sistemas, para lo cual se emplearán y definirán parámetros de complejidad en el espacio de Hilbert para verificar si dichos parámetros, pueden poner de manifiesto algún comportamiento cuántico de los sistemas. Para ello se caracterizarán los descriptores de complejidad discretos y se analizará el comportamiento de algunos sistemas y procesos químicos de interés.
3. Extender los estudios de correlación química tanto en sistemas como en procesos químicos y se retomarán los estudios del fenómeno de correlación electrónica tanto en átomos como en moléculas, bajo la perspectiva de la Teoría Cuántica de la Información, la Complejidad Clásica y la Complejidad Cuántica.
4. Terminar los estudios acerca de la calidad de la densidad electrónica en sistemas y procesos químicos. Para ello, se empleará la entropía relativa de Kullback-Leibler con el fin de comparar las densidades electrónicas generadas por diferentes bases y métodos empleando diferencias de densidad, para finalmente tratar de establecer un criterio informacional de selección de los métodos de estructura electrónica y sobre todo las bases empleadas comúnmente.
5. Emplear las entropías marginales y no marginales para caracterizar sistemas de interés químico, biológico o farmacológico con el fin de estudiar sitios activos o interacciones débiles.
6. Plantear estudios basados en la Teoría Cuántica de la Información para el diseño de fármacos. Teniendo en cuenta las leyes de la conservación de la información en los sistemas.
7. Retomar los estudios acerca de los canales informacionales clásicos y cuánticos ya que es natural vincular el concepto de enlace químico con un canal informacional, con el fin de analizar la estabilidad de algunos sistemas de interés biológico o farmacológico.

8. Ampliar los estudios acerca de la probabilidad conjunta, teniendo el caso de definiciones que involucren mas de 3 subsistemas. Asimismo, se harán las implementaciones computacionales correspondientes a las entropías marginales y no marginales de 3 o más subsistemas.
9. Continuar los estudios sobre la relación entre la reactividad química con la información cuántica y clásica. Para ello, se tratará de establecer formalmente una relación entre las entropías marginales y no marginales presentadas en esta Tesis con la dureza y la energía. Con ello se pretende llevar mas conceptos y herramientas de la Teoría de la Información a la Química.
10. Tratar de encontrar una relación entre la cantidad de sistemas presentes en un ensamble con el entrelazado. Pues un ejemplo como este puede ser considerado como un estudio complementario a los ejemplos de llenados electrónicos mostrados en esta Tesis.
11. Iniciar los estudios del entrelazado en sistemas atómicos polielectrónicos, tomando como referencia los sistemas Na , K , Mg , Ca , de los cuales se mostró que cuando dichos sistemas se someten a un proceso de disociación presentan el entrelazado cuántico. Por ello, se continuará con el estudio de dicho fenómeno teniendo en cuenta un sistema atómico. Como continuación de este estudio se hará la analogía teniendo en cuenta ahora un sistema macromolecular.
12. Tratar de encontrar una relación entre el principio de Hammond con la entropía de Kullback-Leibler, con la finalidad de encontrar una explicación informacional a dicho principio.

13. Al analizar y meditar con el debido cuidado la parte conceptual de la Teoría de Información, ya que es posible establecer una analogía con la Termodinámica:

Analogía entre la Termodinámica y la Teoría de Información Cuántica.		
Termodinámica.	\iff	Teoría Cuántica de la Información.
Entropía.	\iff	Entrelazado.
Procesos adiabáticos.	\iff	Transformaciones locales.
Segunda Ley: Los procesos adiabáticos no disminuyen la entropía.	\iff	Información cuántica: Las transformaciones locales no incrementan el entrelazado.

Esta analogía conduce al siguiente razonamiento:

La entropía en la Termodinámica es un concepto que al aplicarse durante más de doscientos años ha permitido a la humanidad crear máquinas, procesos, y hasta ha permeado nuestro esquema de pensamiento para el diseño de nuevos procesos de tal forma que hablar de la entropía de un proceso, objeto o sistema es enteramente natural, entonces, es posible que el entrelazado de los sistemas químicos sea una característica que al aplicarse en conjunto con la Teoría de Información, nos permita descubrir y entender nuevos aspectos de la Naturaleza. ¿Es posible usar el entrelazado para extraer trabajo? ¿Qué características tendría este “trabajo” extraído de los sistemas de comportamiento cuántico? ¿Este trabajo puede estar relacionado al entrelazado de formación o de destilación? Al caracterizar un sistema o proceso natural, lo perturbamos por el hecho de llevar a cabo una medición ¿cómo es que el entrelazado de un sistema se adapta a esa nueva perturbación?

Preguntas como las anteriores y muchas otras mas que cualquier lector imaginativo puede plantear, conduce a meditar seriamente sobre lo que realmente se sabe sobre el entrelazado de los sistemas y al consecuente cuestionamiento acerca de su aplicación y relación con otras ramas de la ciencia moderna asi como a la gama tan amplia de procesos que ocurren en el mundo y en el universo, para ello es necesario como primer paso diseñar un “proceso ideal” mediante el cual sea posible estudiar algunos de los aspectos mas fundamentales del entrelazado.

Finalmente, se puede decir que en la evolución de los sistemas, la Termodinámica juega un papel importante a través del concepto básico de entropía... Hoy en día el interés se desplaza hacia el estudio de sistemas o procesos alejados del equilibrio, que interactúan a su alrededor a través del intercambio de materia, energía e información.

Apéndice A

Esquema de cálculo de las entropías H y R

Los orbitales naturales atómicos (NAO) de Weinhold, $\{\Theta_k^{(A)}\}$ pueden considerarse como los orbitales naturales efectivos de un dado átomo embebido en un ambiente molecular. Estos orbitales y sus correspondientes eigenvalores se obtienen en la etapa inicial del cálculo para generar los así llamados Natural Bond Orbitals (NBO) mediante un paquete comercial [40] disponible en programas como NBO-G5, Gaussian, Gamess o NwChem.

La metodología NBO permite generar NAO's en bloques atómicos que poseen ortogonalidad inter- e intra-atómica:

$$\langle \Theta_j^{(A)} | \Theta_k^{(B)} \rangle = \delta_{j,k} \delta_{A,B}. \quad (\text{A.1})$$

El algoritmo NAO inicia a partir de una base estándar de orbitales atómicos $\{\chi_j\}$, todos centrados en el átomo A . Así, el cálculo supone determinar una función de onda y posteriormente un operador densidad para cada átomo aislado A (cada átomo localizado en la posición que ocupa en la molécula). Tales cálculos proporcionan NAO's dados en la base atómica:

$$\Theta_k^{(A)} = \sum_k c_{jk}^{(A)} \chi_k. \quad (\text{A.2})$$

Los NAO's se ordenan de acuerdo a su ocupación, que de acuerdo a la intuición química, solamente aquellos orbitales de “core” y valencia son los que poseen una ocupación significativa, es decir que los restantes, conocidos como orbitales tipo “Rydberg”, son residuales y sirven para completar la base.

Es directo definir un operador densidad para el átomo A , $\Gamma^{(A)}$. Así, los NAO $\{\Theta_k^{(A)}\}$ del átomo A se definen como eigen-orbitales de $\Gamma^{(A)}$

$$\Gamma^{(A)} \Theta_k^{(A)} = p_k^{(A)} \Theta_k^{(A)} \quad k = 1, 2, \dots, \quad (\text{A.3})$$

con sus correspondientes eigenvalores (o poblaciones) $p_k^{(A)}$ como

$$p_k^{(A)} = \langle \Theta_k^{(A)} | \Gamma^{(A)} | \Theta_k^{(A)} \rangle. \quad (\text{A.4})$$

De esta forma, los NAO llevan implícito un “Análisis de Población Natural”, que resulta ser apropiado para el cálculo de las entropías marginales y no marginales. Las poblaciones NAO

$(p_k^{(A)})$ suman apropiadamente al número de electrones N y conducen sin ambigüedad a las correspondientes cargas naturales atómicas Q_A

$$Q_A = Z_A - \sum_k p_k^{(A)}, \quad (\text{A.5})$$

sobre el átomo A con carga nuclear Z_A . Las poblaciones atómicas satisfacen automáticamente criterios de positividad y las restricciones de Pauli, es decir, $0 \leq p_k^{(A)} \leq 2$ para el caso de sistemas de capa cerrada, y $0 \leq p_k^{(A)} \leq 1$ para sistemas de capa abierta.

La relevancia que tienen los orbitales atómicos naturales en la Teoría de Información Cuántica se ha puesto en evidencia en un trabajo reciente [21] que proporciona una justificación informacional teórica para realizar transformaciones simétricas en espacio de Hilbert para producir orbitales atómicos de máxima ocupación (naturales) que se generan mediante subbloques atómicos de la matriz densidad guardando simetría angular. Se ha mostrado también que los NAO generados de esta manera permiten asegurar su invariancia rotacional, y su N - y v -representabilidad en un esquema AIM.

El conjunto NAO que es adecuado para un estudio de Teoría Cuántica de Información como el que se plantea en esta Tesis, puede obtenerse fácilmente mediante la metodología NBO de Weinhold o bien de la de Davidson-Löwdin [20]. Aunque también es posible diseñar otros conjuntos usando la metodología general sugerida en la referencia [21] con restricciones adecuadas al problema físico o químico de interés. En este punto es importante mencionar como ejemplo que en el esquema de Weinhold, se utilizaron restricciones tales que las poblaciones de NAO's y NBO's satisfagan criterios químicos tales como ajustar las ocupaciones atómicas y de enlaces a la estructura de Lewis de la molécula [102]. Por lo anteriormente mencionado, reconocemos que las probabilidades atómicas necesarias para representar las entropías de von Neumann discutidas en las secciones 5.4.4 y 5.4.5 pueden obtenerse de las poblaciones de los NAO's mediante la Ec. (A.4). En este trabajo, se utiliza el conjunto de NAO's que se genera en la metodología NBO de Weinhold mediante el programa NBO 5.0 [40]. De acuerdo a las ecuaciones (A.1) y (A.3) se desprende que la matriz de densidad molecular se transforma localmente (ver Sección 5.4) para obtener una matriz diagonal en bloques atómicos: A, B, C, etc. donde cada bloque representa a $\Gamma^{(I)}, \Gamma^{(II)}, \Gamma^{(III)}$ Con un espectro de eigenvalores de los NAO's para cada átomo de acuerdo a la Ec. (A.3).

$$\Gamma(\text{I,II,III}, \dots) = \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{ccc} p_1^{(I)} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & p_i^{(I)} \end{array} \right] \\ \\ \left[\begin{array}{ccc} p_1^{(II)} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & p_j^{(II)} \end{array} \right] \\ \\ \left[\begin{array}{ccc} p_1^{(III)} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & p_k^{(III)} \end{array} \right] \\ \\ \dots \end{array} \right]. \quad (\text{A.6})$$

De aquí se desprende que el conjunto de eigenvalores: $\{p^{(I)}\}$ de $\Gamma^{(I)}$, $\{p^{(II)}\}$ de $\Gamma^{(II)}$, etc. corresponda al conjunto de probabilidades atómicas naturales $\{P_A(I); a = 1, \dots, i\}$, $\{P_B(II); j = 1, \dots, j\}$, etc.

Para un sistema bipartita dado por los subsistemas (fragmentos) A y B de una molécula con N átomos, es obvio que los fragmentos A y B se pueden representar como:

$$A : \{p^I\} \oplus \{p^{II}\} \oplus \dots \oplus \{p^j\} \quad (\text{A.7})$$

y

$$B : \{p^{j+1}\} \oplus \{p^{j+2}\} \oplus \dots \oplus \{p^N\} \quad (\text{A.8})$$

tal que:

$$\Gamma(\text{I,II,III}, \dots) \equiv \Gamma(A, B). \quad (\text{A.9})$$

Los conjuntos de eigenvalores (A.7) y (A.8) se normalizan a la unidad y se calcula la probabilidad conjunta¹.

$$P_{i,j}(A_i, B_j) = \frac{P_i(A) + P_j(B)}{n + m},$$

en donde n y m son las dimensiones de los conjuntos $\{A\}$ y $\{B\}$ respectivamente, de forma que el cálculo de las entropías de von Neumann marginales y no marginales (ver las secciones 5.4.4 y 5.4.5):

$$H(A) = - \sum_i \sum_j P_{i,j}(A, B) \ln \sum_j P_{i,j}(A, B)$$

y

$$R(A) = - \sum_i \sum_j P_{i,j}(A, B) \ln P_i(A),$$

es directo.

¹Véase la sección 5.4.4 en la pág. 49 en donde se dan estas definiciones.

A continuación se da un ejemplo detallado de como calcular las entropías marginales y no marginales, para ello se toma como ejemplo, la molécula de metanol calculada en Gaussian 03 [37], cuyo archivo de entrada tiene los siguientes datos:

```
#P CISD/6-31G Pop=(NPA) Density=current
```

Cálculo de los NPA

```
0, 1
```

```
c
```

```
h          1    hc2
h          1    hc3    2    hch3
h          1    hc4    2    hch4    3    dih4    0
o          1    oc5    2    och5    3    dih5    0
h          5    ho6    1    hoc6    2    dih6    0
```

Variables:

```
hc2          1.0769
hc3          1.0836
hch3        108.9476
hc4          1.0836
hch4        108.9519
dih4        119.0433
oc5          1.4298
och5        106.3138
dih5        -120.4725
ho6          0.9501
hoc6        113.4781
dih6        180.0028
```

Con estas directivas se obtienen los siguientes datos del análisis de población de Weinhold [103] en el archivo de salida:

```
*****Gaussian NBO Version 3.1*****
      N A T U R A L   A T O M I C   O R B I T A L   A N D
      N A T U R A L   B O N D   O R B I T A L   A N A L Y S I S
*****Gaussian NBO Version 3.1*****
```

NATURAL POPULATIONS: Natural atomic orbital occupancies

NAO	Atom	No	lang	Type(AO)	Occupancy
1	C	1	S	Cor(1S)	1.99925
2	C	1	S	Val(2S)	1.08514
3	C	1	S	Ryd(3S)	0.00329
4	C	1	px	Val(2p)	0.75819
5	C	1	px	Ryd(3p)	0.00523
6	C	1	py	Val(2p)	1.22426
7	C	1	py	Ryd(3p)	0.00550
8	C	1	pz	Val(2p)	1.20202
9	C	1	pz	Ryd(3p)	0.00444
10	H	2	S	Val(1S)	0.78359
11	H	2	S	Ryd(2S)	0.00273
12	H	3	S	Val(1S)	0.81290
13	H	3	S	Ryd(2S)	0.00366
14	H	4	S	Val(1S)	0.81290
15	H	4	S	Ryd(2S)	0.00366
16	O	5	S	Cor(1S)	1.99973
17	O	5	S	Val(2S)	1.68496
18	O	5	S	Ryd(3S)	0.00502
19	O	5	px	Val(2p)	1.41616
20	O	5	px	Ryd(3p)	0.00681
21	O	5	py	Val(2p)	1.66137
22	O	5	py	Ryd(3p)	0.00979
23	O	5	pz	Val(2p)	1.95831
24	O	5	pz	Ryd(3p)	0.01520
25	H	6	S	Val(1S)	0.53317
26	H	6	S	Ryd(2S)	0.00274

A partir del listado anterior, se hace una selección de los subsistemas A y B , en este caso, se considera $A = CH_3$ y $B = OH$, por tanto los conjuntos quedan definidos como:

{A} =	1	C	1	S	Cor(1S)	1.99925
	2	C	1	S	Val(2S)	1.08514
	3	C	1	S	Ryd(3S)	0.00329
	4	C	1	px	Val(2p)	0.75819
	5	C	1	px	Ryd(3p)	0.00523
	6	C	1	py	Val(2p)	1.22426
	7	C	1	py	Ryd(3p)	0.00550
	8	C	1	pz	Val(2p)	1.20202
	9	C	1	pz	Ryd(3p)	0.00444
	10	H	2	S	Val(1S)	0.78359
	11	H	2	S	Ryd(2S)	0.00273
	12	H	3	S	Val(1S)	0.81290
	13	H	3	S	Ryd(2S)	0.00366
	14	H	4	S	Val(1S)	0.81290
	15	H	4	S	Ryd(2S)	0.00366

y

{B} =	16	O	5	S	Cor(1S)	1.99973
	17	O	5	S	Val(2S)	1.68496
	18	O	5	S	Ryd(3S)	0.00502
	19	O	5	px	Val(2p)	1.41616
	20	O	5	px	Ryd(3p)	0.00681
	21	O	5	py	Val(2p)	1.66137
	22	O	5	py	Ryd(3p)	0.00979
	23	O	5	pz	Val(2p)	1.95831
	24	O	5	pz	Ryd(3p)	0.01520
	25	H	6	S	Val(1S)	0.53317
	26	H	6	S	Ryd(2S)	0.00274

De acuerdo a las Ecs. (5.3–5.5), el cálculo de la probabilidad conjunta $P(A, B)$ y de los subsistemas $P(A)$ o $P(B)$ para los casos marginales y no marginales es de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 P(A_1, B_1) &= \frac{P(A_1)+P(B_1)}{n+m} \\
 P(A_1, B_2) &= \frac{P(A_1)+P(B_2)}{n+m} \\
 &\vdots \\
 P(A_1, B_m) &= \frac{P(A_1)+P(B_m)}{n+m} \\
 &\vdots \\
 P(A_n, B_m) &= \frac{P(A_n)+P(B_m)}{n+m},
 \end{aligned}$$

en el caso de la probabilidad marginal $P(A)$ o $P(B)$, se procede de la siguiente manera,

$$\begin{aligned}
 P(A_1) &= \frac{P(A_1) \times m + 1}{n+m} \\
 P(A_2) &= \frac{P(A_2) \times m + 1}{n+m} \\
 &\vdots \\
 P(A_n) &= \frac{P(A_n) \times m + 1}{n+m},
 \end{aligned}$$

en donde $P(A_n) = \frac{p(A_n)}{N_A}$ y $P(B_m) = \frac{p(B_m)}{N_B}$, y $p(A_n)$, $p(B_m)$ son los números de ocupación de cada uno de los conjuntos del listado anterior, N_A y N_B corresponden al número de electrones del subsistema $\{A\}$ y $\{B\}$ respectivamente.

Este tipo de algoritmo está diseñado para medir las interacciones de cada uno de los elementos del conjunto $\{A\}$ con todos los elementos del conjunto $\{B\}$ y viceversa, mediante lo cual se consideran las interacciones físicas que tienen los electrones en un sistema atómico o molecular, es decir, los electrones de este tipo de sistemas interactúan con todos los electrones presentes en el sistema excepto consigo mismos.

Lo anterior puede ser traducido en el siguiente algoritmo a partir del cual se pueden calcular todas las entropías informacionales discretas presentadas en este trabajo, que puede ser traducido fácilmente a cualquier lenguaje de programación:

```

for (a = 1; a <= n; a++){
    pa = a/NA;

    for (b = 1; b <= m; b++){
        pb = b/NB;

        pab = (pa + pb)/(n + m);
        PA = (pa*m + 1)/(n + m);
        PB = (pb*n + 1)/(n + m);

        rab = -pab*log(pab);
        ra = -pab*log(pa);
        rb = -pab*log(pb);
        r_cond_ab = -pab*log(pab/pb);
        r_cond_ba = -pab*log(pab/pa);
        r_i = pab*log(pab/(pa*pb));

        ha = -pab*log(PA);
        hb = -pab*log(PB);
        h_cond_ab = -pab*log(pab/PB);
        h_cond_ba = -pab*log(pab/PA);
        h_i = -pab*log(pab/(PA*PB))

        RAB += rab;
        RA += ra;
        RB += rb;
        R_COND_AB += r_cond_ab;
        R_COND_BA += r_cond_ba;
        RI += r_i;

        HA += ha;
        HB += hb;
        H_COND_AB += h_cond_ab;
        H_COND_BA += h_cond_ba;
        HI += h_i;
    }
}

```

En caso de requerirlo el autor de este trabajo ha liberado un conjunto de herramientas escritas en PERL bajo la licencia GPL versión 3 que facilitan el cálculo de éstas entropías a partir de las salidas de Gaussian 03 o de Gaussian 98 disponibles para todos los usuarios, dichas herramientas deberán ser citadas como: PhD. Thesis by Nelson Flores-Gallegos. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. (2009). Las cuales están disponibles por petición directa al autor de esta Tesis al correo: nelsonfloresgallegos@yahoo.com.mx

Apéndice B

Propiedades escalares

B.1. El potencial electrostático molecular

El potencial eléctrico ϕ en un punto P del espacio se define como el trabajo reversible por unidad de carga necesario para mover una carga de prueba infinitesimal, Q_t , desde el infinito hasta P , y se escribe como $\phi_P \equiv \frac{\omega_{\infty \rightarrow P}}{Q_t}$. Cuando hacemos un trabajo reversible, ω , sobre la carga de prueba, cambiamos su energía potencial en ω (del mismo modo que, reversiblemente, un aumento o disminución de masa en el campo gravitacional terrestre cambia su energía potencial). Si tomamos la energía potencial de Q_t como cero en el infinito, tendremos, por tanto $V_p = \omega_{\infty \rightarrow P} = \phi_P Q_t$. La energía potencial V de una carga en un punto P (donde el potencial eléctrico es ϕ_P) es $\phi_P Q_t$. A partir de la definición de ϕ_P , realmente se deduce que en el espacio circundante de un punto de carga Q , el potencial eléctrico es $\phi_P = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 d}$, donde d es la distancia entre el punto P y la carga. El potencial eléctrico es un función de la posición (x, y, z) del punto P en el espacio $\phi(x, y, z)$.

Si el sistema consta de una simple carga puntual Q_A localizada en (x_A, y_A, z_A) , entonces $\phi_1 = \frac{Q_A}{4\pi\epsilon_0 r_{1A}}$, donde r_{1A} es la distancia entre el punto A y el punto 1 con coordenadas (x_1, y_1, z_1) . Si nuestro sistema consta de varias cargas puntuales, entonces cada una de estas cargas contribuye a ϕ , y

$$\phi_1 = \sum_i \frac{Q_i}{4\pi\epsilon_0 r_{1i}}. \quad (\text{B.1})$$

Si el sistema es una molécula, entonces la veremos como un conjunto de cargas nucleares puntuales y cargas electrónicas en una distribución continua. Los electrones pueden ser considerados como cargas puntuales, y no están realmente dispersas en una distribución continua de cargas, pero el modelo de la nube electrónica de carga, es una aproximación razonable, cuando se consideran las interacciones entre dos moléculas que no están demasiado próximas entre sí. La probabilidad de encontrar un electrón en un volumen infinitesimal de un sistema molecular, $dV = dx dy dz$ es ρdV en donde ρ es la distribución de la densidad de probabilidad electrónica. Por tanto, la cantidad de carga electrónica molecular y de los núcleos α , da el potencial eléctrico molecular

$$\phi(x_1, y_1, z_1) = \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha} e}{4\pi\epsilon_0 r_{1\alpha}} - e \iiint \frac{\rho(x_2, y_2, z_2)}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} dx_2 dy_2 dz_2, \quad (\text{B.2})$$

donde r_{12} es la distancia entre los puntos 1 y 2, y la integración se extiende a todo el espacio.

Dentro del ámbito de la Química Cuántica ϕ se le llama comúnmente *potencial electrostático molecular (MEP)*

Para calcular $\phi(x, y, z)$, se calcula la función de onda (aproximada) para la estructura geométrica de equilibrio, se calcula $\rho(r)$, y se usa la Ec. (B.2) para calcular el MEP.

La densidad de probabilidad electrónica $\rho(x, y, z)$ nos dice cómo está distribuida la carga en una molécula. El MEP es una medida de la interacción entre una carga de prueba no polarizada con coordenadas (x, y, z) , con la distribución de las cargas nucleares y electrónicas en la molécula. El MEP, se dibuja comúnmente mediante un mapa de contorno que muestra las curvas ϕ constante en un plano perpendicular a través de la molécula, o por una superficie en el espacio tridimensional en el que ϕ es constante. Los MEP que se obtienen generalmente son positivos en la región espacial de la molécula, debido a la fuerte contribución positiva de los núcleos, fuera de la molécula, ϕ puede ser positivo o negativo.

Cuando dos átomos se aproximan entre sí, el MEP de cada uno de ellos juega un papel clave en su interacción. Una especie electrofílica “atacará”, los sitios del MEP negativos de una molécula, asimismo una especie nucleofílica “atacará” los sitios del MEP positivos.

B.2. El laplaciano de la densidad

Esta propiedad escalar, no esta restringida al escalar ρ sino que cualquier espacio vectorial definido en ${}^3\mathfrak{R}$ puede ser estudiado por el laplaciano. La utilidad del laplaciano radica en el significado físico que tiene esta propiedad escalar.

El laplaciano de la densidad electrónica está definido como

$$\nabla^2\rho = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \rho,$$

el cual puede ser interpretado como:

1. En regiones en las que el laplaciano es negativo, $\nabla^2\rho(r) < 0$, la energía potencial es dominante por tanto existe una acumulación de carga.
2. En regiones en las que el laplaciano es positivo, $\nabla^2\rho(r) > 0$, la energía cinética es dominante por tanto tenemos una remoción de carga.

En el presente trabajo, se uso el siguiente código de color para las isosuperficies del laplaciano de la densidad:

1. Rojo: $\nabla^2\rho < 0$.
2. Azul: $\nabla^2\rho > 0$.

Glosario

Colapso de la función de onda: Es un proceso físico relacionado con el problema de la medición en la Mecánica Cuántica que consiste en la variación abrupta del estado de un sistema después de haber realizado una medición. La naturaleza de dicho proceso es intensamente debatida en las diferentes interpretaciones de la Mecánica Cuántica. Véase la pág. 25.

Correlación electrónica: Es la interacción entre electrones al estar sujetos a un potencial atómico o molecular.

Correlación química: Es la manera en la que los átomos de una molécula se entrelazan naturalmente por virtud de la superposición de estados de la función de onda.

Energía de correlación: Es la diferencia entre una metodología correlacionada y el método de Hartree–Fock.

Entropía clásica: Son aquellas entropías que están dadas en función de una distribución probabilística o bien que dependen de un observable. Ver la explicación de la pág. 35.

Entropía cuántica: Son aquellas entropías que están dadas en términos de una matriz densidad y generalmente se les denomina entropías de von Neumann. Ver la explicación de la pág. 35.

Entropías marginales: Son las entropías von Neumann tipo H .

Entropías no–marginales: Son las entropías von Neumann tipo R .

Entropía de Shannon: Ver Ecs. (3.1–3.3), pág. 17.

Entropía exponencial de Shannon: Ver Ecs. (3.10–3.12), pág. 18.

Entropía simple exponencial de Shannon: Ver Ecs. (3.13, 3.14), pág. 18.

Entropía de Fisher: Ver Ecs. (3.4–3.6), pág. 17.

Medida de complejidad: Ver Ecs. (3.15–3.17), págs. 18.

Medida simple de complejidad: Ver Ecs. (3.18, 3.19), pág. 18.

Medida de desequilibrio: Ver Ecs. (3.7–3.9), pág. 18.

Medida cuántica: Entropías de von Neumann que pueden ser marginales o no–marginales.

Medida clásica: Entropías de Shannon, Fisher o medidas de complejidad.

Medidas informacionales: Son las entropías cuánticas y clásicas

Plano Fisher–Shannon: Ver Ecs. (3.20, 3.21), pág. 18.

Propiedad física o química: Son aquellas propiedades que se obtienen de la ecuación de Schrödinger al colapsar la función de onda y que están relacionadas a un observable.

Sistemas químicos a función de onda constante: Son aquellos sistemas de N electrones cuya función de onda ψ es conocida y se encuentran sujetos a un potencial $\nu(r)$ constante, los cuales nos permiten conocer cómo es la interacción entre dos subsistemas $\{A\}$ y $\{B\}$.

Transformaciones locales: Son aquellas operaciones lineales sobre un estado bi–, tri– o n –partita, que nos permiten transformarlo en otro sin disminuir el entrelazado. Ver la sección 5.4, pág. 37.

Transformaciones globales: Son aquellas que nos permiten cuantificar el entrelazado. Ver la Sección 5.4.2, pág. 45.

Bibliografía

- [1] S. Abe and A. K. Rajagopal. Nonadditive conditional entropy and its significance for local realism. *Physica A.*, 289:157, (2001).
- [2] N. Abramson. *Teoría de la información y condificación*. Paraninfo Madrid, (1986).
- [3] P. S. Albin and D. K. Foley. *Barriers and Bounds to Rationality: Essays on Economic Complexity and Dynamics in Interactive Systems*. Princeton: Princeton University Press, (1998).
- [4] P. W. Anderson. More Is Different. *Science*, 177:393, (1972).
- [5] P. W. Anderson. Physics: The opening to complexity. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 92:6653, (1995).
- [6] J. C. Angulo, J. Antolín, and K. D. Sen. Fisher Shannon plane and statistical complexity of atoms. *Phys. Lett. (in press.)*.
- [7] J. C. Angulo, J. Antolín, and K.D. Sen. Fisher-Shannon plane and statistical complexity of atoms. *Physics Letters A*, 372:670, (2008).
- [8] J. C. Angulo and Antolín J. Atomic complexity measures in position and momentum spaces. *J. Chem. Phys.*, 128, (2008).
- [9] A. Aspect. To be or not to be local. *Nature*, 446:866, (2007).
- [10] A. Aspect, J. Dalibard, and G. Roger. Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers. *Phys. Rev. Lett.*, 49:1804, (1982).
- [11] A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger. Experimental Tests of Realistic Local Theories via Bell's Theorem. *Phys. Rev. Lett.*, 47:460, (1981).
- [12] R. F. W. Bader. *Atoms in Molecules, A Quantum Theory*. Calderon Press Oxford, (1990).
- [13] J. S. Bell. On the Problem of Hidden variables in Quantum Mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, 38:447, (1966).
- [14] C. H. Bennett, H. Bernstein, Popescu S., and B. Schumacher. Concentrating partial entanglement by local operations. *Phys. Rev. A.*, 53:2046, (1996).
- [15] A. Beveratos, R. Brouri, T. Gacoin, A. Villing, J.-P. Poizat, and P. Grangier. Single Photon Quantum Cryptography. *Phys. Rev. Lett.*, 89:187901, (2002).

- [16] I. Bialynicki Birulal and J. Mycielski. Uncertainty Relations for Information Entropy in Wave Mechanics. *Cummun. math. phys.*, 44:129, (1975).
- [17] R. E. Blahut. *Principles and Practice of Information Theory*. Addison–Wesley Publishing Company, (1988).
- [18] A. Bondi. van der Waals volumes and Radii. *J. Phys. Chem.*, 68:441, (1964).
- [19] S. L. Braunstein, C. M. Caves, R. Jozsa, N. Linden, S. Popescu, and R. Schack. Separability of Very Noisy Mixed States and Implications for NMR Quantum Computing. *Phys. Rev Lett.*, 83:104, (1999).
- [20] G. Bruhn, E. R. Davidson, I. Mayer, and A. E. Clark. Löwdin Population Analysis With and Without Rotational Invariance. *Int. Jour. of Quantum Chem.*, 106:2065, (2006).
- [21] E. Carrera Martinez, N. Flores Gallegos, and R. O. Esquivel-Olea. Natural atomic probabilities in quantum information theory. *J. Comp Math. App.*, 233:1483, (2010).
- [22] N. J. Cerf and C. Adami. Entropic Bell inequalities. *Phys. Rev. A.*, 55:3371, (1997).
- [23] N. J. Cerf and C. Adami. Negative Entropy and Information in Quantum Mechanichs. *Phys. Rev. Lett.*, 79:5194, (1997).
- [24] N. J. Cerf and C. Adami. Quantum extension of conditional probability. *Phys. Rev. A.*, 60:893, (1999).
- [25] J. I. Cirac and P. Zoller. Quantum Computations with Cold Trapped Ions. *Phys. Rev. Lett.*, 74:4091, (1995).
- [26] D. Colander, R. P. F. Holt, and B. J. Roseer Jr. The changing face of mainstream economics. *Review of Political Economy*, 16:485, (2004).
- [27] R. H. Day. *Complex Economic Dynamics, Volume 1: An Introduction to Dynamical Systems and Market Mechanisms*. Cambridge: MIT Press, (1994).
- [28] D. DiVincenzo, M. Horodecki, D. Leung, Smolin J., and B. Terha. Locking classical correlation in quantum states. *Phys. Rev. Lett.*, 92:067902, (2004).
- [29] K. E. Edgcombe, R. O. Esquivel, and V. H. Smith Jr. Pseudoatoms of the electron density. *J. Chem. Phys.*, 97:2593, (1992).
- [30] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can Quantum–Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete? *Phys. Rev.*, 47:777, (1935).
- [31] G. F. R. Ellis. Physics, complexity and causality. *Nature*, 435:743, (2005).
- [32] R. O. Esquivel, N. Flores Gallegos, and E. Carrera. von Neumann Entropies Analysis of Nanostructures: PAMAM Dendrimers of Growing Generation. *NSTI-Nanotech*, 3:701, (2008).

- [33] R. O. Esquivel, N. Flores Gallegos, E. M. Carrera, J. S. Dehesa, J. C. Angulo, J. Antolíñ, and C. Soriano Correa. Theoretic-information entropies analysis of nanostructures: ab initio study of PAMAM precursors and dendrimers G0 to G3. *Molecular Simulation.*, 36(5):498, (2009).
- [34] Rodolfo O. Esquivel, Nelson Flores Gallegos, Edmundo Carrera, and Catalina. Soriano Correa. Ab initio study of selected PAMAM dendrimers: von Neumann entropies analysis. *Journal of Nano Research*, page Aceptado, (2009).
- [35] Rodolfo O. Esquivel, Nelson Flores Gallegos, Cristina Iuga, Edmundo Carrera, Juan Carlos Angulo, and Juan Antolíñ. Phenomological description of the transition state, and the bond breaking and bond forming processes of selectec elementary chemical reactions: And information theoretic estudy. *Theoretical Chemistry Accounts*, 124:445, (2009).
- [36] Nelson Flores Gallegos and R. O. Esquivel. von Neumann entropies analysis in Hilbert space for the dissociation processes of homonuclear and heteronuclear diatomic molecules. *Journal of the Mexican Chemical Society.*, 52:17, (2008).
- [37] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr, T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, , J. A. Pople 2004, Gaussian, Inc., and Wallingford CT. Gaussian 03 Revision D.01.
- [38] N. Gisin, G. Ribordy, W. Tittel, and H. Zbinden. Quantum cryptography. *Rev. Mod. Phys.*, 74:145, (2002).
- [39] A. M. Gleason. Measures on the closed subspaces of a Hilbert space. *Journal of Mathematics and Mechanics.*, 6:885, (1957).
- [40] E. D. Glendening, J. K. Badenhop, A. E. Reed, J. E. Carpenter, J. A. Bohmann, C. M. Morales, and F. Weinhold. NBO 5.0.
- [41] N. Goldenfeld and L. P. Kadanoff. Simple Lessons from Complexity. *Science, New Series*, 284:87, (1999).
- [42] S. Guiaşu. *Information Theory with Applications*. McGraw–Hill International Book Company., (1977).

- [43] F. L. Hirshfeld. Bonded-Atom Fragments for Describing Molecular Charge Densities. *Theoret. Chim. Acta (Berl)*., 44:129, (1977).
- [44] M. Hô, H. L. Schmider, D. E. Waver, V. Smith Jr., R. P. Sagar, and R. O. Esquivel. Shannon entropy of the chemical changes: S_N2 displacement reactions. *Int. J. Quantum Chem.*, 77:376, (2000).
- [45] J. Horgan. From complexity to perplexity. *Scientific American*, 95:74, (1995).
- [46] M. Horodecki, J. Oppenheim, and R. Horodecki. Are the laws of entanglement theory thermodynamical?. *Phys. Rev. Lett.*, 89:240403, (2002).
- [47] M. Horodecki, J. Oppenheim, and A. Winter. Partial quantum information. *Nature*, 436:673, (2005).
- [48] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki. Quantum Entanglement. *Rev. Mod. Phys.*, 81:865, 2009.
- [49] I. A. Howard, K. D. Sen, A. Borgoo, and P. Geerlings. Characterization of the Chandrasekhar correlated two-electron wavefunction using Fisher, Shannon and statistical complexity information measures. *Physics Letters A*, 372:6321, (2008).
- [50] Z. Huang and S. Kais. Entanglement as measure of electron correlation in quantum chemistry calculations. *Chem. Phys. Lett.*, 413:15, (2005).
- [51] T. Jennewein, C. Simon, G. Weihs, H. Weinfurter, and A. Zeilinger. Quantum Cryptography with Entangled Photons. *Phys. Rev. Lett.*, 84:4729, (2000).
- [52] F. Jensen. *Introduction to the Computational Chemistry*. John Wiley and Sons, (1999).
- [53] P. Jian Wei, D. Bouwmeester, and M. Daniel. Experimental test of quantum nonlocality in three-photon. *Nature*, 403:515, (2000).
- [54] J. N. Kapur and H. K. Kesavan. *Entropy Optimization; Principles with Applications*. Academic Press Inc., (1992).
- [55] J. D. Kemp and K. S. Pitzer. Hindered Rotation of the Methyl Groups in Ethane. *J. Chem. Phys.*, 4:749, (1936).
- [56] S. Köchen and E. Specker. The Problem of Hidden Variables in Quantum Mechanics. *Journal of Mathematics and Mechanics.*, 17:59, (1967).
- [57] M. Kohout. program D-Grid, version 4.2. (2007).
- [58] A. Kreuter, C. Becher, G. P. T. Lancaster, A. B. Mundt, C. Russo, H. Haffner, C. Roos, J. Eschner, F. Schmidt Kaler, and R. Blatt. Spontaneous Emission Lifetime of a Single Trapped Ca^+ Ion in a High Finesse Cavity. *Phys. Rev. Lett.*, 92:203002-1, (2004).
- [59] S. Kullback. *Information Theory and Statistics*. Dover Publications Inc., (1968).

- [60] T. D. Ladd, J. R. Goldman, F. Yamaguchi, and Y. Yamamoto. All-Silicon Quantum Computer. *Phys. Rev. Lett.*, 89:017901, (2002).
- [61] A. T. Leijonhufvud. A not-too rational macroeconomics. *Southern Economic Journal*, 60:1, (1993).
- [62] I. N. Levine. *Quantum Chemistry*. Prentice Hall, (1991).
- [63] R. López Ruiz, H. L. Mancini, and X. Calbet. A statistical measure of complexity. *Physics Letters A*, 209, (1995).
- [64] P.-O. Löwdin. Quantum Theory of Many-Particle Systems I. Physical Interpretation by Means of Density Matrices, Natural Spin-Orbitals, and Convergence Problems in the Method of Configuration Interaction. *Phys. Rev.*, 97:1474, (1955).
- [65] P.-O. Löwdin. Quantum Theory of Many-Particle Systems II. Study of the Ordinary Hartree-Fock Approximation. *Phys. Rev.*, 97:1490, (1955).
- [66] P.-O. Löwdin. Quantum Theory of Many-Particle Systems III. Extension of the Hartree-Fock Scheme to Include Degenerate Systems and Correlation Effects. *Phys. Rev.*, 97:1509, (1955).
- [67] P.-O. Löwdin and N. Shull. Natural Orbitals in the Quantum Theory of Two-Electron Systems. *Phys. Rev.*, 101:1730, (1956).
- [68] M. Mansuripur. *Introduction to the Information Theory*. Prentice Hall, (1987).
- [69] K. Molmer and A. Sorensen. Multiparticle Entanglement of Hot Trapped Ions. *Phys. Rev. Lett.*, 82:1835, (1999).
- [70] C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano, and Wineland D. J. Demonstration of a Fundamental Quantum Logic Gate. *Phys. Rev. Lett.*, 75:4714, (1995).
- [71] M. E. Montgomery Jr and K. D. Sen. Statistical complexity and Fisher-Shannon information measure of H_2^+ . *Physics Letters A*, 372:2271, (2008).
- [72] E. Morin. *Introducción al pensamiento complejo*. Barcelona: Gedisa, (1995).
- [73] R. S. Mulliken. Electronic Structures of Molecules. *J. Chem. Phys.*, 3:573, (1935).
- [74] R. S. Mulliken. Electronic Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions. I. *J. Chem. Phys.*, 23:1833, (1955).
- [75] A. Nagy and K. D. Sen. Atomic Fisher information versus atomic number. *Phys. Lett. A.*, 360:291, (2006).
- [76] R. F. Nalewajski. Entropic measures of bond multiplicity from the information theory. *J. Phys. Chem. A.*, 104:11940, (2000).
- [77] R. F. Nalewajski. Electronic structure and chemical reactivity: Density functional and information-theoretic perspectives. *Advances in Quantum Chem.*, 43:119, (2003).

- [78] R. F. Nalewajski. Information principles in the theory of electronic structure. *Chem. Phys. Lett.*, 28:372, (2003).
- [79] R. F. Nalewajski. Information theoretic approach to fluctuations and electron flows between molecular fragments. *J. Phys. Chem. A.*, 107:3792, (2003).
- [80] R. F. Nalewajski. Entropic and difference bond multiplicities from the two-electron probabilities in orbital resolution. *Chem. Phys. Lett.*, 386:265, (2004).
- [81] R. F. Nalewajski. Entropy descriptors of the chemical bond in information theory. I. Basic concepts and relations. *Mol. Phys.*, 6:531, (2004).
- [82] R. F. Nalewajski. Entropy descriptors of the chemical bond in information theory. II. Applications to the simple orbital models. *Mol. Phys.*, 6:547, (2004).
- [83] R. F. Nalewajski and E. Broniatowska. Entropy displacement and information distance analysis of electron distributions in molecules and their Hirshfeld atoms. *J. Chem. Phys. A.*, 107:6270, (2003).
- [84] R. F. Nalewajski and R. G. Parr. Atoms in Molecules by Entropy Deficiency Analysis of Molecular Electron Densities. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America.*, 97:8879, (2000).
- [85] R. F. Nalewajski and R. G. Parr. Information theory, atoms in molecules and molecular similarity. *Proc. Nat. Ac. Sci of United States of America*, 97:8879, (2000).
- [86] R. F. Nalewajski and R. G. Parr. Information theory thermodynamics of molecules and their Hirshfeld fragments. *J. Chem. Phys. A.*, 105:7391, (2001).
- [87] R. F. Nalewajski. Information principles in the logic theory. *Chem. Phys. Lett.*, 196:375, (2003).
- [88] R. F. Nalewajski and E. Broniatowska. Information distance approach to the Hammond postulate. *Chem. Phys. Lett.*, 376:33, (2003).
- [89] A. Michael Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge., (2001).
- [90] J. Oppenheim and A. Winter. Uncommon information. *arXiv: quant-ph/0511082 vOppenheim1*. 8 Nov. (2005).
- [91] S. H. Patil and K. D. Sen. Scaling properties of net information measures for superpositions of power potentials: Free and spherically confined cases. *Phys. Lett. A.*, 370:354, (2007).
- [92] F. Pennini and A. Plastino. Localization estimation and global vs. local information measures. *Phys. Lett. A.*, 365:263, (2007).
- [93] A. Peres. Bayesian Analysis of Bell Inequalities. *Los Alamos e-print archive, quant-ph/9905084*.

- [94] J. M. Pérez Jordá and A. D. Becke. Automatic numerical integration techniques for polyatomic molecules. *J. Chem. Phys.*, 100(10):6520, (1994).
- [95] J. R. Pierce. *An Introduction to Information Theory. Second, Revised Edition.* Dober, (1980).
- [96] M. B. Plenio and V. Vedral. Teleportation, entanglement and thermodynamics in the quantum world. *Contemp. Phys.*, 39:431, (1998).
- [97] S. Popescu. Bell’s inequalities versus teleportation: What is nonlocality?. *Phys. Rev. Lett.*, 72:797, (1994).
- [98] S. Popescu. Bell’s Inequalities and Density Matrices: Revealing “Hidden” Nonlocality. *Phys. Rev. Lett.*, 74, (1995).
- [99] F. L. Pryor. *Economic Evolution and Structure: The Impact of Complexity on the U.S. Economic System.* New York: Cambridge University Press, (1995).
- [100] A. K. Rajagopal. Quantum entanglement and the maximum–entropy default states from Jaynes principle. *Phys. Rev. A.*, 60:4338, (1999).
- [101] A. K. Rajagopal and Rendell R. W. Separability and correlations in composite states based on entropy methods. *Phys. Rev. A.*, 66:022104, (2002).
- [102] A. E. Reed, L. A. Curtis, and F. Weinhold. Intermolecular Interactions from a Natural Bond Orbital. Donnor–Acceptor viewpoint. *Chem. Rev.*, 88:899, (1988).
- [103] A. E. Reed, R. B. Weinstock, and F. Weinhold. Natural Population Analysis. *J. Chem. Phys.* 83(2)., 83(2):735, (1985).
- [104] R. P. Sagar and N. L. Guevara. Mutual information and correlation measures in atomic systems. *J. Chem. Phys.*, 123:044108, (2005).
- [105] G. Schaftenaar and J. H. Noordik. MOLDEN: a pre- and post-processing program for molecular and electronic structures. *J. Comput. Aided Mol. Design*, 14:123, (2000).
- [106] N. Schlosser, G. Reymond, I. Protsenko, and Grangier P. Sub–poissonian loading of single atoms in a microscopic dipole trap. *Nature*, 411:1024, (2001).
- [107] E. Schrödinger. *Quantum Theory of Measurement.* Naturwissenschaften, Reimpreso en inglés en J. A. Wheeler and W. Zurek, Princeton Univ. Press, (1983).
- [108] K. D. Sen, C. P. Panos, K. Ch. Chatzisavvas, and Ch. C. Moustakidis. Net Fisher information measure versus ionization potential and dipole polarizability in atoms. *Phys. Lett. A.*, 364:286, (2006).
- [109] C. E. Shannon. A mathematical theory of communication. *The Bell System Technical Journal*, 27:379, (1948).
- [110] C. E. Shannon and W. Weaver. *The mathematical theory of the communication.* University of Illinois Press, (1949).

- [111] Z. Shi and R. Boyd. Transition-State Electronic Structures in S_N2 Reactions. *J. Am. Chem. Soc.*, 111:1575, (1989).
- [112] A. Sorensen and K. Molmer. Quantum Computation with Ions in Thermal Motion. *Phys. Rev. Lett.*, 82:1971, (1999).
- [113] J. P. Stodder. The evolution of complexity in primitive economies: theory. *Journal of Comparative Economics*, 20:1, (1995).
- [114] Y. Timothy, Abouraddy Ayman F., Saleh Bahaa E. A., and Teich. Malvin C. Experimental Violation of Bell's Inequality in Spatial-Parity Space. *Phys. Rev. Lett.*, 99:170408, (2007).
- [115] W. Tittel, J. Brendel, B. Gisin, T. Herzog, H. Zbinden, and N. Gisin. Experimental demonstration of quantum correlations over more than 10 km. *Phys. Rev. A.*, 57:3229, (1998).
- [116] V. Vedral. Relative entropy in quantum information theory. *Rev. Mod. Phys.*, 74:197, (2002).
- [117] V. Vedral and M. B. Plenio. Entanglement measures and purification procedures. *Phys. Rev. A.*, 57:1619, (1998).
- [118] V. Vedral, M. B. Plenio, M. A. Rippin, and P. L. Knight. Quantifying Entanglement. *Phys. Rev. Lett.*, 78:2275, (1997).
- [119] A. Vela and J. L. Gázquez. A Relationship between the Static Dipole Polarizability, the Global Softness, and the Fukui Function. *J. Am. Chem. Soc.*, 112:1490, (1990).
- [120] T. Vicsek. The Bigger Picture. *Nature*, 418:131, (2002).
- [121] J. von Neumann. *Mathematical foundations of quantum mechanics*. Princeton, N. J.: Princeton University Press, (1955).
- [122] H. Wang and Kais. S. Quantum Entanglement and Electron Correlation in Molecular Systems. *arXiv:quant-ph/0701081v1 13 Jan (2007)*.
- [123] W. Weaver. Science and Complexity. *American Scientist*, 36:536, (1948).
- [124] T. Yamanoa. A statistical measure of complexity with nonextensive entropy. *Physica A.*, 340:132, (2004).



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ACTA DE DISERTACIÓN PÚBLICA

No. 0052

Matrícula: 20320091

TEORIA DE INFORMACION
CUANTICA COMO LENGUAJE
CONCEPTUAL EN QUIMICA

En México, D.F., se presentaron a las 12:00 horas del día 8 del mes de enero del año 2010 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

- DR. JOSE LUIS GAZQUEZ MATEOS
- DR. ALBERTO MARCIAL VELA AMIEVA
- DR. ROBIN PREENJA SAGAR
- DR. SALVADOR ANTONIO CRUZ JIMENEZ

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron a la presentación de la Disertación Pública cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

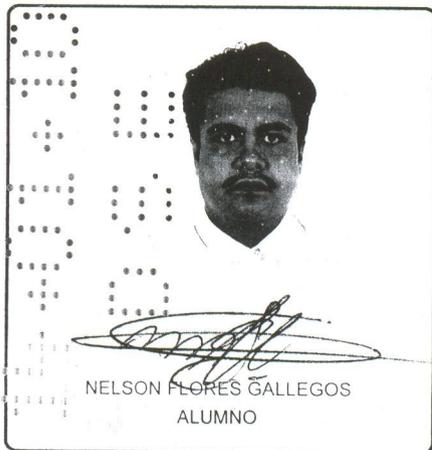
DOCTOR EN CIENCIAS (QUIMICA)

DE: NELSON FLORES GALLEGOS

y de acuerdo con el artículo 78 fracción IV del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

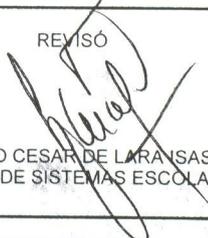
APROBAR

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó al interesado el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.



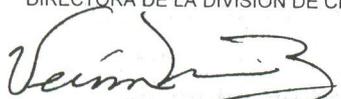
NELSON FLORES GALLEGOS
ALUMNO

REVISÓ



LIC. JULIO CESAR DE LARANSASSI
DIRECTOR DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTORA DE LA DIVISIÓN DE CBI



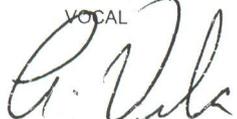
DRA. VERONICA MEDINA BAÑUELOS

PRESIDENTE



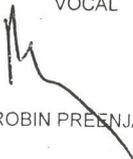
DR. JOSE LUIS GAZQUEZ MATEOS

VOCAL



DR. ALBERTO MARCIAL VELA AMIEVA

VOCAL



DR. ROBIN PREENJA SAGAR

SECRETARIO



DR. SALVADOR ANTONIO CRUZ JIMENEZ