

un bosón. En la Figura 4 mostramos una simulación por ordenador, realizada por Tom Duff, de la función de Laughlin para el caso $\nu = 1/3$, en el cual cada electrón está ligado a 3 vórtices.

Las excitaciones del estado de Laughlin se pueden ver como la creación de vórtices extra en ese condensado. Si extraemos un electrón del mismo, los m vórtices que estaban ligados a él se desligan entre sí, vagando por el material en forma de cuasiagujeros de carga efectiva $-e/m$. Similarmente, si se añade un electrón al líquido, éste se rompe en m cuasipartículas de carga e/m . La fragmentación de la carga ha sido observada experimentalmente por V. Goldman, B. Shu, M. Heiblum, G. Glatti y otros.

REFERENCIAS

- [1] K. von Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, *Phy. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- [2] D. C. Tsui, H. L. Stormer and A. C. Gossard, *Phys. Rev. Letters* **48**, 1559 (1982).
- [3] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Letters*, **50**, 1395 (1983).
- [4] J. P. Eisenstein and H. L. Stormer, *Science* **248**, 1510 (1990).
- [5] A. H. MacDonald, *Science*, pp. 977-987 (1995).

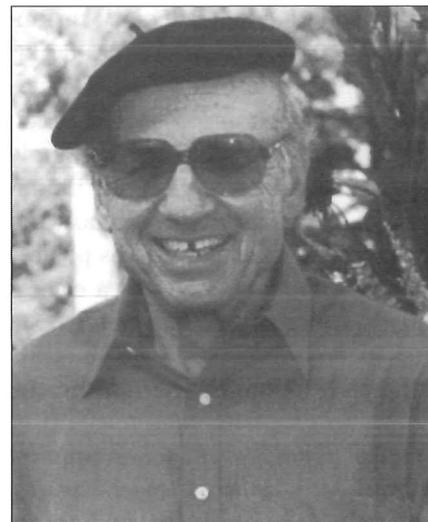
Miguel Giménez Murria
 Depto. de Física de los Materiales

Premios Nobel de Química 1998

La Real Academia de Ciencias Sueca ha elegido a JOHN POPLÉ y WALTER KOHN como Premios Nobel de Química de 1998. Kohn, Profesor de Física en la University of California (Santa Bárbara), ha sido elegido por su "desarrollo de la teoría del funcional de la densidad", mientras que a Pople, Profesor de Química en la Northwestern University, se le cita por haber "desarrollado enteramente los métodos



John Pople.



Walter Kohn.

químico-cuánticos en uso en varias ramas de la química". Aunque ambos han contribuido separadamente, la Academia considera que Kohn y Pople son "dos de las figuras más prominentes ... en el enorme desarrollo teórico y computacional" que ha revolucionado la química (y no solamente la química cuántica) en los últimos años. Actualmente es posible utilizar los cálculos mediante computador para suplementar las técnicas experimentales, siendo posible hacer análisis detallados de la estructura y de las propiedades de la materia. La química cuántica se utiliza hoy en día en prácticamente todas las ramas de la química, contribuyendo muy eficazmente a aumentar nuestro conocimiento y a desarrollar nuevos campos de investigación, tales como el diseño de nuevos medicamentos o la síntesis de sustancias químicas. Este Premio reconoce así el valor predictivo de la denominada Química Cuántica, síntesis de disciplinas como la Química-Física, la Matemática y la Computación.

Los dos premiados han seguido una carrera científica muy distinta, aunque con un interés común en los sistemas de muchos electrones. Kohn, un físico teórico, se ha centrado en sistemas de física de la materia condensada. De hecho, los físicos del área han utilizado extensamente su *teoría del funcional de la densidad* para estudiar las estructuras electrónicas desde que fue for-

mulada a mediados de los años 60. Y más recientemente, la comunidad de químicos la ha aplicado en el cálculo de la estructura molecular. Y es ahí donde Pople, Doctor en Matemáticas, ha concentrado gran parte de su trabajo: la estructura electrónica de las moléculas. Desde los años 60, Pople y sus colaboradores han creado programas de computador basados en la aproximación Hatree-Fock para el cálculo de moléculas complejas: ese trabajo ha supuesto un esfuerzo de varias décadas de innovación y continua mejora, y en los años 90 han incorporado en su seno las aproximaciones que permite el formalismo del funcional de la densidad. Se calcula que hoy en día la mitad de los cálculos de la estructura electrónica en química se hacen usando dicho formalismo.

LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

Si bien la aplicación de la mecánica cuántica en física fue prácticamente inmediata, su utilización en química tardó mucho más tiempo. La razón estriba en que no hay manera práctica de simplificar las relaciones matemáticas de la mecánica cuántica para sistemas tan complejos como las moléculas.

El punto de partida de cualquier cálculo de un sistema de N electrones es la ecuación de Schrödinger; en principio con ella podemos eva-

luar la energía del sistema y su función de onda, que dependerá de las coordenadas de todas las partículas del sistema. Es una ecuación sencilla de escribir, pero en principio imposible de resolver; si nos limitamos a los cálculos con átomos, por ejemplo, se sabe que sólo es posible resolver de manera analítica el problema del átomo de hidrógeno (esto es, un único electrón bajo la atracción electrostática de un protón supuesto éste puntual) y ya no se puede resolver exactamente el átomo de helio, con dos electrones. En un sistema multielectrónico, un electrón se mueven en el campo creado por el resto de los electrones del sistema, por lo que es necesario acudir al cálculo con ordenador para poder aproximar su solución. En el átomo de helio la solución computacional es tan precisa como los resultados experimentales, pero para sistemas con más electrones este procedimiento requiere el uso de aproximaciones que nos permitan simplificar el problema.

Una primera aproximación es suponer que los electrones siguen conservando una cierta individualidad en el sistema multielectrónico. De esta manera, se moverán de manera independiente y estarán descritos por orbitales independientes, cada uno de esos orbitales obedecerá una ecuación de Schrödinger monoeléctronica, cuya función de onda sólo depende ahora de las tres coordenadas del electrón que estamos considerando. La función de onda completa del sistema, que tiene $3N$ coordenadas, es el producto antisimétrico de estos orbitales que estamos considerando. Tendremos ahora un conjunto de tantas ecuaciones monoeléctronicas de Schrödinger como electrones haya en el sistema: como el potencial que actúa sobre ese orbital será el campo del núcleo y el campo medio de los demás electrones del sistema, entonces es necesario resolver ese conjunto de N ecuaciones diferenciales de manera iterativa y constituye la base de la tradicional aproximación de Hartree-Fock (formulado en los años 30). Dentro de la Quí-

mica Cuántica convencional la determinación de las propiedades moleculares ha pasado habitualmente por la resolución de la ecuación de Schrödinger en su versión Hartree-Fock. La dificultad más grande que tiene este procedimiento es que el potencial que siente cada orbital es *no local*, por lo que es necesario integrar en todo el espacio para conocer el potencial en un punto. Esta no localidad del potencial aparece porque estamos considerando la interacción de intercambio entre los electrones (pues tienen espín).

Para optimizar esa aproximación, y aprovechando la linealidad de la ecuación de Schrödinger, en los años 50 se propuso escribir los orbitales monoeléctronicos como una combinación lineal de un conjunto determinado de *funciones base*. De esta manera el problema de resolver el conjunto de ecuaciones diferenciales se convierte en el problema de diagonalizar matrices (que es muy apropiado para ser resuelto con un computador). En los años 60, la aproximación de Hartree-Fock se resolvía mediante este procedimiento matricial, usando funciones gaussianas como el conjunto de funciones base. Es imprescindible entonces calcular las integrales de atracción electrón-núcleo, de repulsión electrón-electrón, y de energía cinética electrónica, que involucran a las funciones de base atómicas (orbitales de Slater generalmente) con las que se construye la función de onda de prueba. Un proceso variacional bien establecido mezcla tales funciones de base para obtener las combinaciones lineales óptimas que se denominan *orbitales moleculares autoconsistentes*. Hecho esto, y aplicando los métodos habituales de la Mecánica Cuántica para calcular valores medios, pueden obtenerse las energías moleculares, los momentos dipolares y demás magnitudes de interés

Hay que hacer notar que en la descripción anterior hemos tenido en cuenta el espín de los electrones, y por ello la función de onda es totalmente antisimétrica. Si nos olvidáramos

del espín, la función de onda es entonces sencillamente el producto de todos los orbitales y obtendríamos una ecuación de Schrödinger monoeléctronica mucho más sencilla de resolver, pues el potencial es *local*. Esta es la aproximación de Hartree, que no incluye ni la interacción de intercambio ni la correlación coulombiana entre los electrones.

LA TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD

Por otra parte, en 1964 Hohenberg y Kohn (que coincidieron como visitantes en la *École Normale Supérieure*, en París) demostraron que un sistema de electrones interactuantes, bajo la acción de un potencial externo, puede expresarse enteramente en términos de su densidad. Además, y esto es lo realmente importante, se puede calcular la energía del sistema aplicando un principio variacional: existe un funcional de la densidad (esto es, una aplicación que nos da un valor real para cada una de las posibles funciones que representen la densidad electrónica del sistema) cuyo mínimo es la energía del estado fundamental del sistema. Esto significa que ya no sería necesario integrar una ecuación de Schrödinger multielectrónica, con $3N$ coordenadas, para calcular la energía: pasamos, pues, de un problema matemático de una gran número de dimensiones a otro en sólo tres y esto para cualquier tipo de sistema que se quiera considerar.

El formalismo del funcional de la densidad no es, sin embargo, una panacea: no se conoce el funcional cuya minimización nos daría la energía del estado fundamental del sistema. Pasamos de desconocer la función de onda del sistema a desconocer el funcional de la energía del sistema. Sin embargo, el que la densidad de electrones se convierta en la piedra clave del sistema multielectrónico ha demostrado tener una gran influencia tanto desde un punto de vista conceptual como desde el punto de vista del cálculo. Una de las razones para ello es el

trabajo que Kohn y Sham desarrollaron posteriormente, en el que demostraron que usando el formalismo del funcional de la densidad se puede evaluar la energía de cualquier sistema interactuante mediante un cálculo de N ecuaciones similares a las de Hartree, esto es, cada orbital cumple una ecuación de Schrödinger y sufre la acción un potencial local, que incluye *todas* las interacciones del sistema. El punto definitivo ahora es aproximar este potencial local para describir adecuadamente las propiedades del sistema. Este procedimiento abre, pues, la puerta para incluir de manera completamente general la descripción de las interacciones entre los electrones (el intercambio y la correlación entre los electrones): mediante un potencial que es computacionalmente sencillo y conceptualmente muy novedoso.

El teorema de Hohenberg y Kohn dio base teórica a un procedimiento aproximado de cálculo atómico que lleva el nombre de Thomas-Fermi y que se usaba también desde los años 30, aunque sólo era útil para argumentos cualitativos sobre la estructura atómica y que no aportó nada nuevo al desarrollo de la química cuántica. Por otra parte, las ecuaciones de Kohn y Sham formalizaron las ideas previas de Slater de utilizar la densidad en cada punto para el cálculo de la energía de intercambio.

Ese procedimiento de Kohn y Sham se ha utilizado como método generalizado de cálculo en el área de la materia condensada: ha permitido calcular desde la energía de las distintas fases cristalinas de un sólido, pasando por las distintas estructuras superficiales de los sólidos, hasta el estudio *a priori* de las propiedades de los nuevos materiales semiconductores, fabricados mediante crecimiento epitaxial. Además, mediante la idea de Car y Parrinello, ha sido posible implementarlo en cálculos de dinámica molecular *ab initio*, en los que se incluye la estructura electrónica del material que se está describiendo.

EL BOOM DE LA QUÍMICA CUÁNTICA: LA APLICACIÓN DE LOS COMPUTADORES

Como ya hemos comentado, la complejidad de la tarea de resolver una molécula mediante un conjunto de *funciones base* es enorme y crece con el número de núcleos y electrones a considerar. Piénsese, por ejemplo, que para un conjunto de M funciones de base el número de integrales bieléctricas va como M^4 y son corrientes números del orden de 2000 para M . Por ello se han propuesto diversos esquemas de aproximación: los *métodos semiempíricos*, que parametrizan las integrales aludidas con información teórico-experimental; y los *métodos ab-initio*, que calculan rigurosamente todas las integrales y usan un conjunto auxiliar de funciones gaussianas para representar a la base atómica original.

Las contribuciones de John Pople han sido decisivas en estos desarrollos. Sin pretender exhaustividad, mencionaremos tres piezas clave de su trabajo. La primera es la teoría *semiempírica* PPP (Pariser-Parr-Pople, 1953) para estudiar sistemas electrónicos de moléculas orgánicas planas. La segunda son los *métodos semiempíricos de solapamiento diferencial nulo* (CNDO, INDO, etc., desarrolladas entre 1965 y 1970) que poseen un ámbito de aplicación más amplio que el anterior, sin la restricción a moléculas planas. Y la tercera la constituyen las diferentes y cada vez más completas versiones de los denominados *métodos ab-initio Gaussian* (en cuya elaboración ha sido necesaria la participación de un buen número de especialistas). Estas versiones comenzaron por el Gaussian-70 y a intervalos de entre 2 y 6 años han llegado hasta el Gaussian-98. Tales piezas de investigación rebosan imaginación, habilidad matemática y sensibilidad químico-física, y no creo que sea atrevido afirmar que todos aquellos que hemos tenido la oportunidad de trabajar en profundidad con alguno de éstos métodos hemos aprendido desde sofisticadas

técnicas de programación de computadores hasta química avanzada (y de la básica también).

Pople fue de los primeros químicos que se dio cuenta de las posibilidades de los ordenadores para predecir las propiedades moleculares, apuntando que los métodos teóricos podrían hacerse un hueco importante en la química sólo si sus resultados demostraran ser siempre precisos: de esa manera el valor predictivo del cálculo podría compararse con los resultados experimentales. Pople y sus colaboradores fueron capaces de programar los computadores muy eficazmente, de tal manera que la rapidez de los cómputos demostró que se podían convertir en herramientas cotidianas de trabajo. Aunque obviamente se obtengan resultados más espectaculares con los grandes ordenadores, Pople ha sido uno de los pioneros en la potenciación del uso de los ordenadores de tamaño medio (lo que hoy se llaman estaciones de trabajo).

Primeramente, Pople y sus colaboradores se esforzaron en desarrollar un conjunto único de funciones base para describir los orbitales monoeléctricos, de manera que pudieran servir para cualquier tipo de molécula. De manera sistemática, confrontaron los cálculos obtenidos con sus funciones base con los resultados experimentales para mejorar la descripción empírica de sus orbitales. Por otra parte, fueron capaces de reducir en un factor de 10 a 100 veces el tiempo en que el ordenador necesitaba para evaluar las integrales necesarias para un cálculo de Hartree-Fock (que pueden suponer de 10^6 a 10^9 en un cálculo estándar y que en general son en seis dimensiones).

En la década de los 70 los químicos ya podían garantizar una precisión de aproximadamente el 1% en alguno de sus cálculos moleculares Hartree-Fock, lo que permitía evaluar energías de enlace y energías de reacción. Pero este método olvidaba la energía de correlación entre los electrones. También Pople y sus colaboradores contribuyeron a describir esta interacción y utilizando

teoría de perturbaciones de hasta cuarto orden mejoraron la precisión de sus cálculos hasta aproximadamente un 0.1%.

Conviene aquí insistir que Pople se dio cuenta que no era suficiente con calcular la energía para conseguir una herramienta de interés general en química. La característica más importante de una molécula reside en su estructura, esto es, las distancias y los ángulos de enlace y esas son las magnitudes que deben ser calculadas en la química cuántica. Una parte importante del desarrollo de Pople y colaboradores es el desarrollo de los métodos para determinar las estructuras de equilibrio, los caminos posibles para las reacciones químicas y la determinación de las barreras de energía para las reacciones.

Las dificultades de los *métodos semiempíricos* radican en las parametrizaciones empleadas, que los hacen más o menos válidos dependiendo de las propiedades estudiadas para las moléculas. Por el contrario, los *métodos Gaussian* pretenden calcular las propiedades de cualquier tipo de molécula, bien aislada o en disolución, bien en su estado fundamental o en sus estados excitados, utilizando una base suficientemente grande y bien diseñada (triple Z, séxtuple-Z, etc). Claramente, esto implica un gran esfuerzo en tiempo de cálculo y de almacenamiento. En aplicaciones a moléculas de interés biológico es hoy habitual utilizar procesadores en paralelo involucrando memorias RAM de 1Gb, memorias de 'scratch' de 20 Gb y algunas otras características que desbordan las escalas de uso normal. Para paliar estas constricciones los últimos paquetes de programas Gaussian además de incorporar los útiles, aunque menos rigurosos, cálculos semiempíricos contienen también una interesante serie de opciones. Así, entre otras muchas, mencionaremos las siguientes: el cálculo con átomos pesados puede realizarse con pseudopotenciales; las integrales ya no son almacenadas sino que se calculan "en directo" dentro de

cada ciclo iterativo empleando aproximaciones iniciales que se refinan exactamente hasta llegar a la autoconsistencia; se utilizan técnicas que permiten reducir la evaluación de las M^4 integrales a un número del orden de M ; y finalmente, la selección automática del tipo de cálculo óptimo para la computadora disponible en el momento.

Todo este esfuerzo ha cristalizado en un programa llamado GAUSSIAN, que ofrece excelente precisión en sus cálculos y una facilidad de uso encomiable. A partir de los años 70 ese programa, que hoy en día está comercializado y puede considerarse como el *padre* de otros programas también comerciales, se ha utilizado en áreas de conocimiento bien dispares: química, ingeniería química, física molecular, geología, astrofísica y astroquímica, farmacología, ciencia de materiales,... Hoy estos diferentes tipos de cálculo están ampliamente difundidos hasta el punto de que especialistas en otras áreas pueden usarlos rutinariamente para extraer información relevante para sus investigaciones de reactividad química, diseño de fármacos, espectroscopía y otras.

LA SINERGIA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD Y DE LA QUÍMICA CUÁNTICA

La excelente precisión de los resultados de la química cuántica hizo que el formalismo del funcional de la densidad, que había sido tan promisorio y tan fructífero para los físicos desde un principio, resultara por el contrario poco atractivo para los químicos. Por una parte, los físicos utilizaron el formalismo basándose en aproximaciones válidas para un sistema de electrones homogéneo, lo que hace poco justificado su uso en química. Por otra parte, desde el punto de vista del funcional de la densidad, muchos fenómenos químicos requieren el cálculo de diferencias de energía que son muy pequeñas. Aquí, pues, se podría hacer el comentario de un texto clá-

sico de química cuántica (aplicado a otro asunto) de que para calcular el peso del capitán de un barco no parece el mejor procedimiento el efectuar la resta del peso del barco con el capitán en la cubierta menos el peso del barco sin él.

Por ello, sólo en los años 90 se ha incorporado la teoría del funcional de la densidad en los programas de computador de química cuántica. Eso se debe, por una parte, a que en los últimos años (con el trabajo de Langreth, Perdew y Becke) se ha mejorado notablemente la descripción de la parte correspondiente al intercambio y la correlación del potencial local de las ecuaciones de Kohn y Sham. La otra razón para ello es el creciente interés en las moléculas de gran tamaño, lo que da una mayor importancia a la simplificación de cálculos que el funcional de la densidad conlleva. Como resultado, hoy en día es posible calcular estructuras de varios cientos de átomos, que permiten explicar por ejemplo el por qué de algunas reacciones enzimáticas o estudiar la relación entre la estructura y las propiedades espectroscópicas de un metal de transición que contiene proteínas.

Como resumen, se podría decir que las dos líneas de trabajos teóricos que la fundación Nobel ha premiado permiten, pues, obtener información que es difícil o imposible de conseguir mediante los experimentos. Como ejemplo de sus aplicaciones se puede citar que mediante estas herramientas pueden predecirse las propiedades de un fármaco antes de sintetizarlo, lo que ahorra esfuerzo y dinero. También es posible estudiar la dinámica de moléculas de baja estabilidad y de gran interés científico y práctico, como las moléculas del espacio intergaláctico o de capas altas de la atmósfera, y esto es muy difícil de hacer en un laboratorio. Como último ejemplo, y dada la especificidad de la catálisis, los programas de química cuántica se pueden utilizar para entender los mecanismos de acción para, posteriormente, poder diseñar nuevos catalizadores.

PERFILES BIOGRÁFICOS

John Anthony Pople, hoy uno de sus máximos exponentes de la Química Teórica, ha sido galardonado con el Premio Nobel de Química 1998 por sus trabajos sobre la metodología del cálculo teórico de propiedades moleculares. La concesión de esta suprema distinción a John Pople es tan de merecida justicia como tardía. John Pople nace el 31 de Octubre de 1925 en Burnham, Somerset (Inglaterra), y cursa estudios de Matemática en la Universidad de Cambridge consiguiendo sus grados de 'Bachelor of Arts' (BA), 'Master of Arts' (MA) y 'Doctor of Philosophy' (PhD) en 1946, 1950 y 1951, respectivamente. Durante el período 1951-1958 y dentro de esa famosa Universidad permanece asociado al Trinity College desempeñando tareas docentes e investigadoras en Matemática. Posteriormente se traslada a Pittsburgh en los Estados Unidos para ejercer de docente en el Carnegie Institute (1961-1962) y en la Universidad Carnegie-Mellon (1964-1991). Es probable que el lector no avisado esperara que estas últimas tareas docentes hubieran estado vinculadas a disciplinas matemáticas. Lejos de ello, ¡John Pople desempeñó tareas docentes como profesor de Química y de Química-Física! Tal vez, esta actitud interdisciplinar, tan abierta y carente de complejos, pueda ser un referente útil para todos. Desde 1986 John Pople forma parte del profesorado de la Universidad de Northwestern (Evanston, Illinois). Su fructífera carrera científica está jalonada con la concesión de otros Premios que ya presagiaban el Nobel: Premio de la Fundación Wolf en Química (1992), Medalla Kirkwood de la Sociedad Americana de Química (1994), y Premio J.O. Hirschfelder en Química Teórica del Instituto de Química Teórica (1994).

Walter Kohn, nacido el 9 de marzo de 1923 en Viena (Austria), tuvo que abandonar Austria a los 16 años debido a la ocupación nazi y pasó dos años en Inglaterra antes de viajar a Canadá. Allí, mientras tra-

bajaba como físico en la industria y geofísico, se graduó de 'Bachelor of Arts' (BA) en 1945 y de 'Master of Arts' (MA) en 1946 en matemática aplicada (Universidad de Toronto). En 1948 se doctoró (PhD) en la Universidad de Harvard, bajo la dirección de J. Schwinger. Trabajó en la Carnegie Mellon University desde 1950 a 1960, cuando se mudó a la Universidad de California en San Diego. En 1979 se le nombró como director del recién fundado Instituto de Física Teórica, radicado en el *campus* de Santa Barbara de la Universidad de California. Después de cinco años en el puesto, pasó a ser profesor en el Departamento de Física de dicho *campus*, donde actualmente es profesor emérito.

Kohn ha tenido una amplia influencia en amplias ramas de la física de la materia condensada. En el campo del cálculo de la estructura electrónica, hay un método de cálculo de estructura de bandas en sólidos cristalinos que es conocido como *método de Kohn-Korringa-Rostoker*. Cabe hablar también de la *anomalía de Kohn* al estudiar la dinámica de las redes cristalinas, así como el *modelo de Luttinger-Kohn* de los estados de impureza en semiconductores. Esta actividad científica le ha reportado premios de mucho prestigio, como el Premio Buckley (1960), el Premio Davison-Germer de la Sociedad Americana de Física (1977), la Medalla Nacional de las Ciencias (1988) y la Medalla Feenberg (1991).

José Enrique Alvarellos
Depto. de Física Fundamental

Luis M. Sesé
Depto. de Ciencias y
Técnicas Fisicoquímicas

Echenique y Méndez, Premios Príncipe de Asturias 1998

La concesión del premio Príncipe de Asturias de Investigación Científica y Tecnológica de 1998 a los físicos PEDRO ECHENIQUE y EMILIO



Pedro Echenique.

MÉNDEZ ofrece una oportunidad para reflexionar sobre algo que con frecuencia se entiende mal en España: la relación entre la ciencia básica y las aplicaciones. Necesitamos un arco continuo que vaya desde la ciencia que se preocupa por las leyes fundamentales de la materia hasta la que busca sobre todo a las propiedades aplicables y continúe luego hasta la tecnología. Pedro Echenique y Emilio Méndez son dos magníficos científicos con personalidades muy ricas; los dos participan de esos dos rostros de la ciencia. Sin duda Méndez hace ciencia más aplicada y Echenique más básica, por eso nos incitan esta reflexión, pero son dos intelectuales reflexivos capaces de cuestionar la ciencia en su globalidad.

Pedro Echenique es catedrático de Física de la Materia Condensada en la Facultad de Química de la Universidad del País Vasco en San Sebastián. Ha trabajado en varios centros extranjeros, como el laboratorio de Oak Ridge (EEUU), el Instituto Bohr de Copenhague o las universidades de Lund, Munich y Cambridge, donde trabajó con Philip Anderson, Premio Nobel de Física. Es un científico que ha ensayado la política, ya que durante cuatro años fue Consejero de Educación del Gobierno Vasco, retirándose en 1984 de ese mundo para concentrarse de nuevo, con