



# REAL ACADEMIA DE DOCTORS

---

## L'entropia en dos finals de segle



Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari electe

Excm. Sr. David Jou i Mirabent

Doctor en Ciències Físiques

A l'acte de la seva recepció, 26 de març de 1996, i

discurs de contestació de l'acadèmic de número

Excm. Sr. Pere Miró i Plans

Doctor en Ciències Químiques

Barcelona

1996







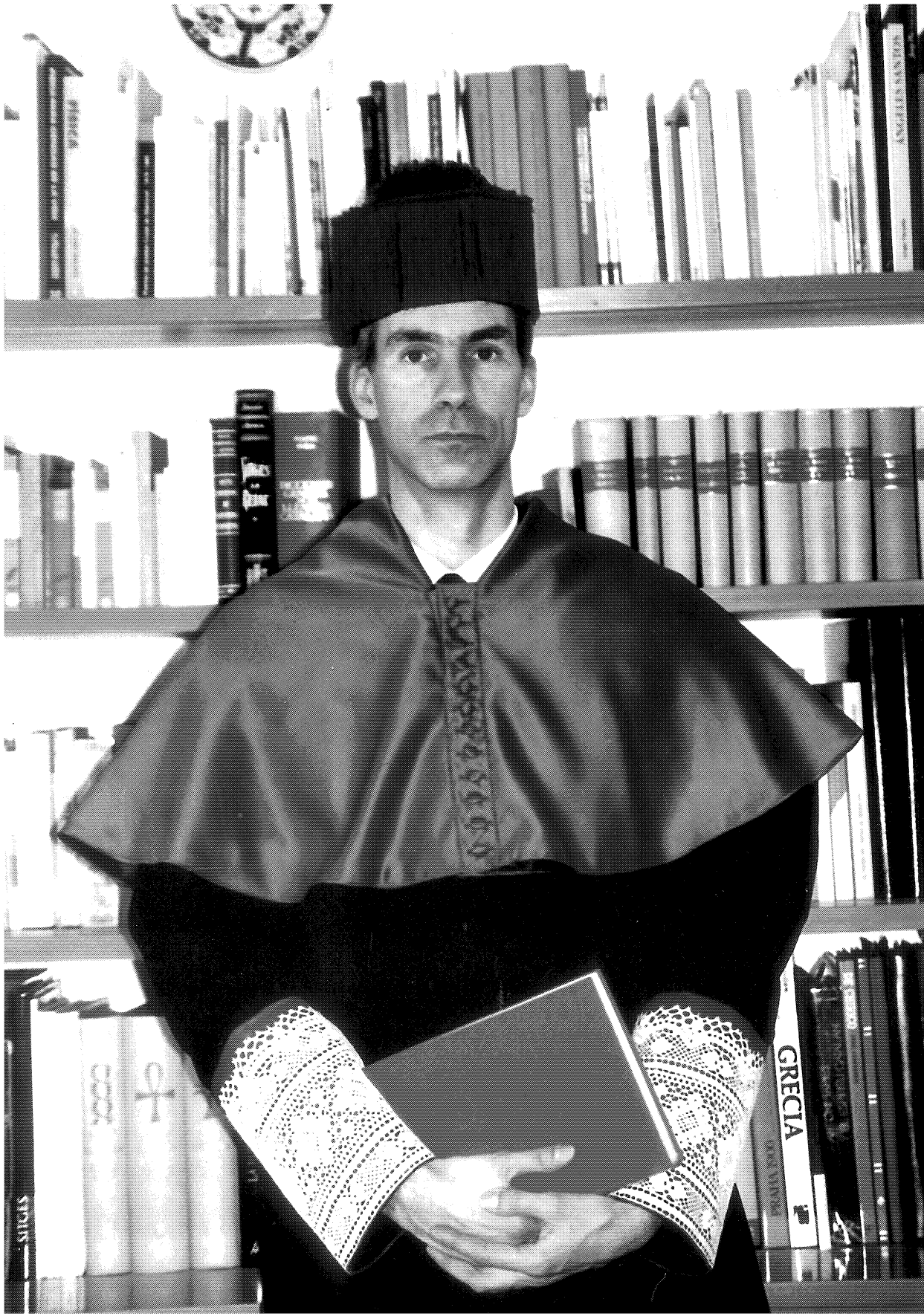
Dr. David Jou i Mirabent

L'entropia en dos finals de segle

REAL ACADEMIA DE DOCTORS

-Publicacions-









*Excm. Sr. President*

*Excms. Srs. Acadèmics*

*Senyores i senyors:*

Una vegada més al llarg de la meua carrera professional, dec a la Termodinàmica una profunda satisfacció. En aquest cas, la d'haver estat invitat a formar part d'aquesta Reial Acadèmia de Doctors, invitació que dec, més que als meus mèrits, a la generositat benvolent dels seus Acadèmics i del seu President, Excm. Sr. Josep Casajuana. A ells, per la seva confiança, manifesto de forma ben explícita el meu agraïment. Estic segur que l'ambient pluridisciplinar d'aquesta Acadèmia, la categoria dels seus membres i el nivell dels seus intercanvis científics i humanístics em resultaran un estímul valuós i una invitació permanent a l'obertura d'esperit.

No podria cloure la secció d'agraïments sense esmentar la persona l'ensenyament de la qual desvetllà en mi la curiositat i la fascinació per aquesta matèria. Em refereixo al Professor Dr. José Casas Vázquez, el qual ja a segon curs de la llicenciatura-

ra en Ciències Físiques, a la Universitat Autònoma de Barcelona, va saber transmetre en les seves classes l'elegància formal i l'amplitud d'aplicacions de la Termodinàmica clàssica. Més important encara: va aconseguir de superar el risc de presentar la Termodinàmica com una ciència tancada, acabada i perfecta, parany freqüent en aquesta matèria singular, i assenyala amb contagiós entusiasme una de les seves fronteres més fèrtils, la Termodinàmica fora de l'equilibri, riquíssima en problemes conceptuals que en toquen els fonaments més profunds i plena de promeses d'aplicació en camps molt diversos. El Professor Casas Vázquez, que fou, després, el Director de la meva Tesi Doctoral, té una especial sensibilitat pels problemes més bàsics i subtils de la fonamentació conceptual de la Termodinàmica. La meua relació amb ell, al llarg de més de vint-i-cinc anys, ha estat i segueix essent extraordinàriament fructífera i hem recorregut, juntament amb els qui foren companys de carrera i segueixen essent amics i col·legues en diverses universitats, els Drs. Josep Enric Llebot, Carlos Pérez García, José Miguel Rubí i Diego Pavón, un camí considerable per una sèrie de qüestions que albiràvem, a l'inici, en un horitzó remot i anhelat i que avui ens resulten plenament familiars. Haver compartit en tantes ocasions l'excitació d'alguns nous resultats, haver-nos encoratjat conjuntament a superar les dificultats i desencisos que tota recerca comporta, ha establert entre nosaltres un caliu perdurable.

Dedicaré aquest discurs a un tema que ha estat l'objectiu principal de les nostres recerques, la formulació del segon principi de la Termodinàmica, una de les lleis més generals i subtils i de més impacte cultural de la Física, i de la definició d'entropia, magnitud central en aquesta llei, concepte expansiu i polisèmic. Procuraré fer-ho, tant com em sigui possible, des d'una visió de caire general, en què la ciència no es vegi tan sols com a coneixement especialitzat, sinó també com a font de suggeriments i d'estímul de caràcter global, com una font d'inspiració i fecundació cultural.

Explicaré en primer lloc la formulació clàssica del primer i el segon principi, evocaré alguns dels conflictes que sorgiren a

finals del segle passat en la interpretació d'aquest darrer i, per acabar, explicaré alguns dels problemes oberts que avui, a finals del nostre segle, ens porten a aprofundir en aquest tema de recerca. Tractaré, doncs, d'inserir la Termodinàmica dintre d'aquesta referència general, que ens ajuda, de passada, mitjançant la comparació de dos finals de segle, a veure des d'una perspectiva especialment àmplia alguns problemes actuals i a fer una prospectiva dels nostres horitzons propers.

### *1. Els principis de la Termodinàmica clàssica*

La Termodinàmica nasqué a principis del segle XIX com a ciència dedicada a l'estudi de les màquines tèrmiques, en un moment en què aquestes constituïen l'avantguarda tecnològica i modificaven profundament la societat. El primer resultat completament general de la Termodinàmica fou obtingut per Sadi Carnot el 1824, i estableix un límit superior per a l'eficiència amb què hom pot transformar calor en treball en una màquina tèrmica. De mica en mica, la Termodinàmica s'anà independitzant de l'estudi concret de les màquines tèrmiques, el qual esdevingué un simple cas particular en una ciència cada vegada més àmplia, dedicada a l'estudi de les transformacions energètiques en general i als seus efectes sobre les diverses propietats dels sistemes macroscòpics.

A meitats del segle passat, per obra, sobretot, del berlinès Rudolf Clausius i de l'escocès William Thomson, Lord Kelvin, la Termodinàmica formulà els seus dos principis bàsics: el primer, o de la conservació de l'energia, i el segon, o de l'augment de l'entropia en sistemes aïllats. El camí per a establir aquests dos principis no fou pas planer. Per tal de formular el primer, calgué que Mayer i Joule, vers el 1850, demostrassin amb experiments irrefutables que la calor, com el treball, és una forma d'intercanvi de l'energia, tot trencant així una tradició multiseular a considerar-lo com una substància especial, ja fos el foc d'Empèdocles, el flogist de Stahl o el calòric de Lavoisier.

Pel que fa al segon principi, la introducció del concepte d'entropia per part de Clausius, el 1865, permeté de donar una enorme amplitud al seu enunciat. En la seva definició, Clausius relacionava l'entropia amb el quocient de la calor intercanviada entre el sistema i diverses fonts tèrmiques, en processos reversibles, dividida per la temperatura absoluta de les esmentades fonts. El 1850, aquest mateix autor havia formulat el segon principi com la impossibilitat que la calor flueixi espontàniament de sistemes freds a sistemes calents o, amb més precisió, com la impossibilitat de construir cap màquina tèrmica cíclica que tingui com a únic efecte transportar calor d'un sistema fred a un de calent. Sempre m'ha sorprès com a partir d'un enunciat en aparença tan intuïtiu i tan simple hom pugui arribar a extreure'n conseqüències tan subtils com ara el rendiment màxim dels intercanvis energètics, les condicions precises dels equilibris químics, o relacions completament generals entre diverses magnituds dels sistemes macroscòpics. Aquesta generalitat és deguda precisament a la possibilitat de formular el segon principi en funció de l'entropia, magnitud profundament vinculada a la irreversibilitat dels canvis, ja que en sistemes aïllats aquesta magnitud pot augmentar, o restar invariable, però no pot mai disminuir: dóna lloc, així, a una fletxa del temps, és a dir, a un sentit ben determinat als processos físics irreversibles.

Aquests dos principis suscitaren immediatament l'atenció dels filòsofs. Advertim, en primer lloc, que els dos principis difereixen radicalment pel que fa a un aspecte que ha estat una font constant de reflexió filosòfica: la permanència i el canvi. La permanència de l'Ésser, defensada per Parmènides en l'Antiguitat, ressona en el principi de conservació de l'energia. La ubiqüitat del canvi, nucli de la filosofia d'Heràclit, constitueix el contingut essencial del segon principi.

El primer principi, amb la introducció del concepte d'energia, subministra un element de permanència i immutabilitat rera els canvis del món, element que la filosofia havia cercat fins aleshores en el concepte d'àtom. L'atomisme filosòfic, en efecte, fou una forma de conciliar la permanència de Parmènides, ma-

nifestada en àtoms immutables, amb el canvi d'Heràclit, manifestat en el seu moviment i les seves associacions efímeres. Aquesta excitació filosòfica és ben explícita tant en els escrits de Mayer com en algunes conferències de Joule, que exultaven d'haver trobat un element de permanència en el món. No quedava prou clar, però, si calia interpretar l'energia com una substància (que alguns intentaren de conciliar amb els àtoms tot suposant que aquests eren vòrtexs del fluid energètic) o d'una manera nominalista, interpretant l'energia com un simple nombre que denotava relacions d'equivalència entre els estats dels sistemes i limitava les transformacions possibles de la naturalesa. La rellevància de l'energia com a element de permanència quedà intensificada en descobrir, cap a finals de segle, que els àtoms, en lloc de ser immutables, sofrien les transformacions de la radioactivitat, troballa que suposà un cop considerable als postulats de l'atomisme filosòfic.

La relació entre increment d'entropia i irreversibilitat temporal suscità també l'interès dels filòsofs, que hi vegeren una formulació matemàtica quantitativa de l'experiència intuïtiva de la irreversibilitat i l'envelliment. Aquesta evolució en una sola direcció dugué, entre d'altres, a la conclusió de la mort tèrmica de l'univers, que estaria caracteritzada per un refredament de les estrelles i una igualació de les temperatures de tots els objectes, estat a partir del qual ja no hi hauria evolució possible i que suposaria, doncs, la fi de la possibilitat de qualsevol procés. Per aquest motiu, l'entropia depassà ràpidament l'àmbit del coneixement especialitzat i el segon principi esdevingué una de les lleis físiques de més impacte cultural. En una frase molt citada del seu llibre sobre *Les dues cultures*, C.P.Snow afirmà que una persona culta hauria de conèixer el segon principi de la Termodinàmica amb la mateixa familiaritat amb què hauria de conèixer i apreciar l'obra de Shakespeare. Per citar tan sols dos exemples de com la segona llei impressionà els filòsofs, recordaré que Eugeni d'Ors, el 1912, dedicà un dels seus cursos a l'Institut d'Estudis Catalans a l'exposició comentada del segon principi, i que en *El sentimiento trágico de la vida*, Unamuno, tot i el seu proverbial desdeny per la ciència, recull en diverses ocasions la res-

sonància tràgica del segon principi. Posteriorment, l'entropia no ha fet sinó incrementar la seva presència cultural, relacionada amb conceptes tan fascinants com els de desordre, informació o estructura.

La tensió entre permanència i canvi és viscuda amb especial intensitat, avui, en les qüestions referents a l'energia. Com comprendre l'afany per aprofitar l'energia si aquesta és una magnitud conservada, si no es crea ni es destrueix sinó que resta constant? És el segon principi on cal cercar aquesta inquietud: l'augment de l'entropia implica una degradació de l'energia, una disminució de la seva disponibilitat per obtenir-ne treball. La tensió filosòfica entre quantitat i qualitat té en les dues lleis un escenari d'especial profunditat: conservació de la quantitat, segons el primer principi; minva de la qualitat, segons el segon principi.

## *2. Finals de segle XIX: atomisme i entropia*

El tipus de coneixement de la realitat física que proposa la Termodinàmica planteja qüestions epistemològiques de gran interès. La Termodinàmica pretèn un coneixement macroscòpic, que relacioni diverses propietats de conjunt dels sistemes sense entrar en la naturalesa concreta dels seus components. Això és alhora la seva força i la seva feblesa: d'una banda, aquest prescindir dels components concrets fa que les seves prediccions tinguin una universalitat extraordinària; d'altra banda, el no concretar els elements fa que les seves prediccions es quedin, en un cert sentit, a mig camí, sense arribar a precisar-ne valors numèrics determinats. Així, per exemple, la Termodinàmica és capaç de relacionar la diferència de les calors específiques a pressió constant i a volum constant amb la compressibilitat isotèrmica i amb l'índex de dilatació dels sistemes, siguin quins siguin aquests sistemes, però no pot determinar, en canvi, el valor concret de cap d'aquestes magnituds per a cap sistema concret. Aquesta independència de la naturalesa concreta del sistema ha permès que resultats termodinàmics obtinguts en èpo-

ques en què els models bàsics de la naturalesa de la calor o de la matèria eren erronis, com per exemple en la teoria del calòric, hagin subsistit immutables quan hom ha modificat i corregit aquesta interpretació microscòpica. Els resultats de Carnot sobre el rendiment màxim de les màquines tèrmiques, o els de Poisson i Laplace sobre la velocitat del so, o els de Fourier sobre la conducció de la calor, foren formulats en el marc de la teoria del calòric, però són més generals que aquesta i han romàs vàlids quan el calòric ha estat oblidat.

Una manera oposada, però complementària, d'abordar la descripció dels sistemes és considerar-los com a compostos per partícules amb interaccions ben conegudes, i aplicar una combinació de mecànica i de mètodes estadístics per a arribar a descriure el sistema. Aquesta formulació presenta l'avantatge de poder arribar a calcular valors concrets de les magnituds indicades, però té l'inconvenient d'haver de dur a terme una anàlisi més o menys individualitzada de cada sistema. D'altra banda, si bé els ingredients de tipus mecànic o electromagnètic són ben coneguts, la formulació dels aspectes estadístics constitueix un problema fonamental, l'anàlisi del qual ha de comptar amb informació termodinàmica de tipus general, per tal de poder ser relacionada amb els experiments i amb la informació que del món ens subministren els sentits.

La universalitat del coneixement termodinàmic, que impressionà profundament el jove Einstein, és a les antípodes del pensament reduccionista que ha impregnat la ciència, en especial la física i la biologia, del nostre segle. En el pensament reduccionista, la legitimitat d'un coneixement prové de fonamentar-lo sobre les característiques concretes dels components dels sistemes, siguin quarks i leptons, o siguin parells de bases o aminoàcids. En el pensament termodinàmic, l'essencial és, en canvi, allò independent del coneixement concret dels elements de base. Aquesta diferència de punts de vista hauria de ser més una complementaritat que no pas una oposició. Tot i això, en nombroses ocasions ambdós punts de vista han entrat en conflicte i han donat lloc a polèmiques diverses.

Una figura emblemàtica, pel que fa a la relació entre descripció macroscòpica i microscòpica dels sistemes termodinàmics, és Ludwig Boltzmann, nascut el 1844 a Viena i mort a Duino, el 1906. Boltzmann, un dels físics més importants de la història, és recordat sobretot per dues aportacions bàsiques, ineludibles. En primer lloc, establí una descripció dels sistemes macroscòpics, basada en una estadística sobre les propietats de les partícules que el componen, tot aprofundint àmpliament i generalitzant idees anteriors de James Clerk Maxwell, una altra de les grans figures de la física. Boltzmann deduí una equació per a l'evolució de la funció de distribució de velocitats de les molècules d'un gas, que ens permet de calcular-ne els coeficients de transport (com ara les conductivitats tèrmica i elèctrica, o la viscositat, o el coeficient de difusió) a partir de les característiques de les interaccions entre les seves molècules. En segon lloc, Boltzmann proposà una relació entre entropia i probabilitat de l'estat termodinàmic, que constitueix la clau que permet de passar del món microscòpic al món macroscòpic. La possibilitat, a més, d'interpretar el desordre molecular en funció de la probabilitat del macroestat o, en altres termes, en funció del nombre d'estats microscòpics compatibles amb l'esmentat estat macroscòpic, permet d'associar l'entropia amb el desordre molecular del sistema, de manera que a entropia creixent correspon un desordre molecular creixent. La tendència a incrementar l'entropia en sistemes aïllats pot ser interpretada doncs com una tendència a augmentar el desordre i evolucionar vers estats més probables. Per aquestes dues aportacions fonamentals, el nom de Boltzmann perdurarà en la història de la física.

Però convé situar Boltzmann en el seu ambient, en l'"apocalipsi joiosa" de la Viena de finals de segle. Klimt, Schiele, Kokoschka en pintura; Freud en psicologia; Hoffmanstahl, Musil, Kraus en literatura; Bruckner en música... Boltzmann, professor de física, participà en aquest ambient intens. Al principi, de jove, la seva participació és joiosa: la d'un enamorat de la literatura i de la música, com ha estat evocat per Angel Terron en un dels poemes del seu llibre *Ternari*. Festes, tertúlies, divulgació científica, tasca a la qual Boltzmann dedicà una activitat intensa



i imaginativa, complementen la seva activitat de recerca en una primera etapa feliç i exultant. Però els seus estudis sobre la naturalesa atòmica de la matèria, sobre la relació entre el món microscòpic i el macroscòpic, el fan entrar en conflicte creixent amb l'ortodòxia positivista, defensada a Viena per Ernst Mach, físic i filòsof de la ciència, que tanta influència va tenir sobre el pensament del jove Einstein i en l'ambient cultural de la capital de l'imperi austrohongarès.

Per al positivisme de l'època, els àtoms constituïen, en el millor dels casos, una ficció útil, un model mental, una hipòtesi provisional, però no pas cap realitat física. Com que el positivisme deslegitima les qüestions que no siguin directament contrastables empíricament, i com que en aquells moments no hi havia cap constatació directa de l'existència dels àtoms, Mach, i diversos físics de l'època, com Ostwald i molts d'altres de menys coneguts, atacaren amb contundència aquesta visió atomística i hi oposaren la visió macroscòpica de l'energètica, en què només els conceptes macroscòpics, a l'abast directe de la mesura, tenien valor i sentit.

A aquestes qüestions de principi s'afegiren, tot seguit, algunes de les paradoxes més subtils de la física, que sorgeixen en intentar harmonitzar una descripció atomística, microscòpica, regida per la mecànica reversible i determinista, i una descripció termodinàmica, macroscòpica, regida per les lleis irreversibles de la Termodinàmica. Les paradoxes de Zermelo i de Loschmidt, basades en la reversibilitat microscòpica o en l'etern retorn dels sistemes finits a estats arbitràriament propers a un estat donat, segons el teorema de Poincaré, afinaren al màxim les contradiccions entre temps reversible i temps irreversible. O, encara, altres paradoxes: el contrast aparentment irreconciliable entre la tendència a un increment del desordre molecular en els sistemes físics i la tendència vers un increment de l'ordre i l'estructura en els sistemes biològics. En la qüestió dels àtoms, Boltzmann contra Mach i els positivistes. En la qüestió del temps, Boltzmann contra Newton i els físics mecànics. En la qüestió de l'ordre, Boltzmann contra Darwin i els evolucionis-

tes. Massa fronts oberts, massa batalles en aquesta combinació del món microscòpic i el macroscòpic.

Boltzmann, vell i fatigat, acabà suïcidant-se. Si hi pogué més la batalla científica o la creixent pèrdua de la visió o les fatigues de l'edat, no ho sabem pas. Boltzmann morí el 1906 a Duino, petita localitat turística propera a Trieste, sobre la mar Adriàtica, freqüentada per turistes vienesos. No puc pensar en Duino sense evocar les elegies que Rilke començà a escriure en el penyassegat del castell d'aquesta ciutat, una nit tempestuosa i màgica, entre les ones que s'esberlaven als seus peus i la ventada que cavalcava sobre el seu cap. D'aquella sensació d'ofec i de terror, Rilke en tragué els primers versos de la primera elegia: "Qui, si jo cridés, em sentiria entre els ordes angèlics?"

La tomba de Boltzmann, al cementiri de Viena, conté com a epitafi la fórmula de l'entropia, brevíssima (una d'aquelles equacions sòbries, concises i definitives, compostes tan sols de tres o quatre símbols). Però la mort de Boltzmann es produeix en un moment en què els seus mètodes inicien, paradoxalment, la màxima revolució del món microscòpic, la mecànica quàntica. Però per a això cal passar de Viena a Berlín i a Berna.

A Berlín, el 1900, Max Planck combina les idees microscòpiques de Boltzmann sobre l'entropia i interpolacions heurístiques de magnituds termodinàmiques per a estudiar la distribució espectral de la radiació del cos negre. El seu èxit rotund i inesperat marca el naixement de la mecànica quàntica, el primer indicatiu que la naturalesa no intercanvia l'energia de manera contínua sinó en paquets discrets, els quanta. A Berna, el 1905, Albert Einstein calcula l'entropia de la radiació electromagnètica i en dedueix la plausibilitat que aquesta estigui quantificada en fotons, la naturalesa discreta dels quals podria posar-se de manifest en la fotoionització i en l'efecte fotoelèctric. Dos anys després, Einstein reblarà encara el paper fundacional de la Termodinàmica en la mecànica quàntica tot obtenint, a partir de la hipòtesi de la quantificació de les vibracions atòmiques en una xarxa cristal·lina, l'anul·lació de la calor específica prop del zero

absolut de la temperatura, donant per primera vegada una interpretació microscòpica de l'aleshores tot just formulat tercer principi de la Termodinàmica, i fent fer un pas important a la teoria quàntica, fins aleshores limitada a la radiació electromagnètica.

No deixa de ser paradoxal que els mètodes termodinàmics, macroscòpics, juguin un paper important a obrir la porta a la mecànica quàntica, microscòpica. D'altra banda, això posa de manifest com la intuïció de Boltzmann, afinada després amb nous mètodes més generals per l'americà Josiah William Gibbs, pogué ser útil per a plantejar les primeres pistes d'una nova mecànica. Precisament, pel fet que la Termodinàmica és independent de la natura microscòpica concreta, permet prou generalitat i prou ambigüitat per fer el pas d'una mecànica antiga a una mecànica nova. La combinació d'idees macroscòpiques i microscòpiques s'advera, doncs, màximament fructífera.

Cap a meitats de segle, les idees de Boltzmann foren ampliadades a un camp especialment subtil, el de la teoria de la informació. Shannon, als Estats Units, vegé que és possible d'avaluar quantitativament la informació d'un missatge mitjançant una fórmula anàloga a la que Boltzmann ideà per a relacionar entropia i probabilitat. Amb això, l'entropia ampliava el seu radi d'acció i el seu contingut conceptual, que esdevenia amplísim: irreversibilitat, desordre, informació, i es començava a utilitzar en àmbits tan diversos com l'economia, la literatura, la biologia molecular, l'economia o la geografia humana.

### *3. Un segle de reduccionisme*

Però la nova mecànica quàntica, juntament amb la descoberta dels electrons i dels àtoms, amb els treballs de Thompson sobre l'electró, i de Rutherford i de Bohr sobre l'estructura atòmica, havia d'obrir l'etapa més excitant i eufòrica de la visió microscòpica del cosmos. Electrons, nuclis, protons, neutrons, antielectrons: de mica en mica, els elements fonamentals de la

matèria eren posats al descobert i la mecànica quàntica anava aclarint la raó fonamental de la taula periòdica, de la constitució i l'estabilitat de la matèria. La nova perspectiva atragué la majoria de físics, que abandonaren així molt camps clàssics de la física, com la física de fluids, la mecànica de medis continus o la termodinàmica.

No és estrany que aquesta eufòria propiciés una apoteosi del reduccionisme, és a dir, del punt de vista segons el qual la missió essencial de la ciència consisteix a esbrinar els elements bàsics de la matèria i les seves interaccions bàsiques, i a explicar tota la realitat en funció d'aquests elements bàsics. Tota la realitat no seria, doncs, sinó un reflex dels elements bàsics, sense necessitat de cap més llei física. És obvi, és clar, que per comprendre un mecanisme, o un text literari, no n'hi ha prou amb desmuntar-lo, sinó que cal saber-lo tornar a muntar; és a dir, no basta un esforç analític, de descompondre el sistema en les seves parts, sinó que cal, també, una tasca de síntesi que sàpiga tornar a muntar el mecanisme a partir d'aquestes. Es pensava, però, que per a això n'hi havia prou amb els mètodes estadístics preconitzats per Boltzmann, és a dir, es creia prou conegut i dominat el procediment de síntesi, i només es donava per interessant el procediment d'anàlisi.

En aquest procés reduccionista hi ha algunes fites essencials. Pel que fa a la física, aquest objectiu es planteja sota el programa d'unificació de les forces bàsiques, és a dir, gravitació, electromagnetisme, interaccions nuclears feble i forta, i d'unificació de les partícules elementals, un dels programes científics més ambiciosos i impressionants de la història. Enormes acceleradors de partícules, col·laboracions internacionals a gran escala, han donat com a fruit l'elegant sistematització de la multitud de partícules subatòmiques en tres famílies de quarks i de leptons, amb la unificació de la força electromagnètica i la nuclear feble, i un nou impuls a la comprensió de la interacció forta a partir de la cromodinàmica quàntica. La cosmologia, per la seva banda, aportà una nova empenta al projecte reduccionista, tot subministrant una visió molt elegant sobre la formació gradual de la matèria,

en els tres primers minuts de l'Univers per als àtoms lleugers o en el si de les estrelles per als elements més pesants, i l'aparició d'estructures cada vegada més complicades a mesura que augmenta l'edat de l'Univers i en disminueix la temperatura.

Si a principis dels anys 1910 era la física la que havia estimulat aquest pensament reduccionista, a principis dels anys 1950 és la biologia la que hi donarà un impuls renovat, amb la troballa de l'estructura en doble hèlix dels àcids nucleics i amb la descoberta del codi genètic. De cop, la biologia esdevenia biologia molecular i deixava de banda, com havia passat abans en la física, moltes de les seves branques clàssiques, com la zoologia o la botànica. La medicina passava a cercar les causes cel·lulars i moleculars de les malalties, tot permetent una acció més selectiva i eficaç per al seu tractament.

El resultat d'aquests programes de comprensió de l'estructura bàsica de la matèria són impressionants i inquietants alhora: en física, la descoberta de les reaccions nuclears obrí el pas a la potència brutal de noves armes, mentre la descoberta dels semiconductors iniciava l'època de l'electrònica i permetia ampliar extraordinàriament les telecomunicacions i la computació. En medicina, la comprensió bàsica de la biologia molecular permet de donar un fort impuls a la farmacologia més moderna i posa les bases d'una enginyeria biològica basada en el control de la informació genètica.

Seria massa llarg descriure l'evolució i els èxits d'aquests programes reduccionistes. En lloc de fer-ho, passaré a comentar el nostre final de segle, encara impregnat d'aquest reduccionisme però, alhora, amb la presència de diversos intents de legitimar novament el punt de vista macroscòpic, no reduccionista .

#### *4. La Termodinàmica fora de l'equilibri*

És hora de tornar a la Termodinàmica. Malgrat la defecció de la majoria dels físics, la Termodinàmica segueix suscitant

l'atenció d'un nombre reduït però apassionat d'investigadors. El punt de vista predominant entre els físics és que la Termodinàmica és una branca clàssica, acabada i perfecta, sense cap nou problema a indagar. Ara bé, malgrat la impressionant riquesa i vastitud dels seus resultats, la Termodinàmica clàssica només estudia els estats d'equilibri termodinàmic. Així, per saber si és possible la transició des d'un cert estat d'equilibri  $A$  a un altre estat d'equilibri  $B$  (quan hom elimina restriccions internes que mantenen el sistema en l'estat d'equilibri  $A$ ), hom compara l'entropia de  $B$  amb la d' $A$ . Si l'entropia de  $B$  és més gran que la d' $A$ , la transició és, en principi, possible, mentre que és impossible en el cas oposat. La Termodinàmica de l'equilibri, però, no s'interessa pels detalls concrets del procés real que duu el sistema des d' $A$  fins a  $B$ , ni estudia quant de temps caldrà per dur a terme aquest procés. Aquest objectiu queda reservat a una sèrie de lleis de transport o equacions cinètiques, l'estudi de les quals és un dels propòsits de la termodinàmica fora de l'equilibri.

Tant l'energia com l'entropia són magnituds que caracteritzen cada estat d'un sistema. Hi ha, però, una diferència bàsica entre elles: l'energia pot ser assignada a qualsevol estat, d'equilibri o fora d'equilibri, mentre que l'entropia només pot ser assignada, en la teoria clàssica, als estats d'equilibri del sistema, és a dir, a estats independents del temps i carents de fluxos interns. La versió clàssica de la segona llei només compara les entropies dels estats inicial i final d'equilibri, però no sap definir l'entropia en els estats de no equilibri i, en conseqüència, no pot dir res sobre el comportament del sistema mentre aquest es troba en estats de no equilibri pels quals discorre durant el procés.

Una qüestió natural és, doncs, com s'hauria de definir l'entropia en estats de no equilibri i com caldria formular el segon principi en situacions fora de l'equilibri, és a dir, quines restriccions s'hauria de considerar sobre el comportament possible de l'entropia al llarg del procés entre els estats d'equilibri inicial i final. A més del seu interès teòric, aquesta qüestió té un gran in-

terès pràctic, ja que les restriccions de la segona llei ajuden a esbrinar quines equacions de transport són admissibles en la descripció dels sistemes. Les equacions de transport estableixen, per exemple, amb quin ritme es transmet la calor entre dos punts a diferents temperatures (llei de Fourier) o amb quin ritme flueix la càrrega elèctrica entre dos punts a diferent potencial elèctric (llei d'Ohm), o amb quin ritme es transporta la matèria entre punts caracteritzats per diferents concentracions d'un cert solut (llei de Fick). Així, les lleis de transport juguen un paper bàsic en la descripció del ritme amb el qual pot tenir lloc la transició entre dos estats. La Termodinàmica de l'equilibri, en canvi, només diu si l'esmentada transició és o no possible, però no conté cap informació sobre el ritme amb què tindrà lloc l'esmentat procés. Objectius de la Termodinàmica fora de l'equilibri són, doncs, establir les lleis cinètiques o de transport compatibles amb les restriccions del segon principi i descriure els estats estacionaris fora de l'equilibri, com ara els éssers vius.

El procediment clàssic que ha estat a la base de les recerques en Termodinàmica de no equilibri ha estat basat en la hipòtesi de l'equilibri local. Els estats de no equilibri són, en general, inhomogenis, i hom no els pot assignar una temperatura o una pressió globals, sinó que aquestes canvien de punt en punt (i, fins i tot, si l'estat no és estacionari, varien amb el temps). La hipòtesi de l'equilibri local considera que el sistema es pot descompondre mentalment en petits subvolums, prou petits com per poder ser considerats pràcticament homogenis, cadascun dels quals caracteritzat per una temperatura i una pressió ben definides. Segons la hipòtesi de l'equilibri local, hom podria considerar cadascun d'aquests subvolums en equilibri intern, cosa que permetria d'assignar-li una entropia, ja que aquesta magnitud està ben definida per a estats d'equilibri. Finalment, l'entropia global de l'estat de no equilibri seria la suma de les entropies de cadascun dels subsistemes en què ha estat descompost mentalment el sistema global. Així, sense introduir cap element conceptual radicalment nou, hom aconsegueix de passar a l'estudi de situacions fora de l'equilibri.

## 5. *Necessitat d'una nova Termodinàmica fora de l'equilibri*

La hipòtesi de l'equilibri local ha resultat molt fructífera en la pràctica, i ha constituït la base de molts treballs científics, entre els quals destaquen, per esmentar només dos investigadors, els de Lars Onsager (premi Nobel de Química de 1968) i Ilya Prigogine (premi Nobel de Química de 1977). Tanmateix, tot i el seu interès pràctic, la hipòtesi de l'equilibri local no és satisfactòria a nivell conceptual, ja que constitueix una simple aproximació que no indica pas com tractar de manera ben fonamentada l'assignació d'una entropia als estats de no equilibri. Pel que fa a la seva vàlida pràctica, deixa de ser satisfactòria en la descripció d'estats prou allunyats de l'equilibri, és a dir, caracteritzats o bé per fortes inhomogeneïtats (gradients elevats de temperatura, de concentració, de potencial elèctric, de velocitat) o bé per variacions molt ràpides dels seus paràmetres.

Deixant de banda les motivacions més teòriques, les implicacions tecnològiques resulten prou rellevants per a motivar la necessitat d'una teoria termodinàmica més general. La tecnologia actual malda per obtenir dispositius més ràpids, més miniaturitzats i més potents. Els estats en què es troben aquests dispositius durant el seu funcionament són més i més allunyats de l'equilibri com més s'atansen a aquesta triple frontera. En aquestes situacions, les lleis de transport clàssiques deixen de proporcionar una bona descripció dels processos i han de ser substituïdes per lleis més generals (no locals, amb efectes de memòria i efectes no lineals) i els fluxos són tan elevats que hom ja no pot suposar que els seus efectes sobre l'entropia són negligibles.

Així, hom arriba a pertorbacions de freqüència tan elevada que el seu període és comparable al temps mitjà entre les col·lisions de les molècules que componen el sistema, o bé hom arriba a sistemes tan miniaturitzats que la seva grandària esdevé comparable al recorregut lliure mitjà de les molècules entre col·lisions successives. En aquests casos, les lleis clàssiques de transport esdevenen inadequades, les equacions cinètiques resulten problemàtiques i els límits de vàlida de la termodinàmica



mica clàssica són àmpliament depassats: hom entra en un territori nou i complex de la fenomenologia i del concepte. Una metàfora de la vida pràctica ens ajudarà, potser, a comprendre això. L'aspecte de la història varia considerablement si la mirem de segle en segle, d'any en any o de dia en dia. El tractat d'història, l'anuari o els diaris tenen una quantitat d'informació força diferent. La perspectiva temporal va fent irrellevant la majoria de la informació quotidiana fins a deixar només les grans línies dels llibres d'història. Quelcom semblant s'esdevé amb els sistemes físics: freqüències més elevades impliquen més complexitat, més diversitat, més detall, que van essent eliminats a mesura que el ritme d'observació és més i més lent.

Ens veiem, doncs, abocats a reprendre la consideració de les qüestions més bàsiques de la Termodinàmica: com definir l'entropia en estats allunyats de l'equilibri? Com formular la segona llei de la Termodinàmica en aquestes situacions ràpides, miniaturitzades i potents que es troben fora de l'abast de la hipòtesi de l'equilibri local? Aquestes qüestions són, precisament, les que han centrat la nostra recerca durant una vintena d'anys. Com que la solució general del problema sembla molt complexa, hem centrat el nostre estudi en situacions prou simplificades matemàticament però prou atractives i clares físicament. Aquesta anàlisi ens ha permès de contestar algunes d'aquestes qüestions en alguns casos concrets, tot introduint algunes generalitzacions de l'entropia que, a diferència de l'entropia clàssica, depenen dels fluxos i estan definides fora de l'equilibri i que susciten en una renovació de qüestions termodinàmiques fonamentals. Aquestes respostes tenen l'interès d'obrir una possible via a una comprensió més general d'aquestes qüestions absolutament bàsiques sobre les quals la teoria clàssica resta absolutament muda.

Possibles situacions d'interès pràctic es refereixen, per exemple, a les lleis de transport en dispositius electrònics molt miniaturitzats, a l'intercanvi energètic en presència de gradients de temperatura molt elevats, com en la interacció d'un pols potent de làser amb un metall o amb una esfera de deuteri sòlid en

fusió nuclear; o al diagrama de fases de dissolucions de polímers en presència de gradients de velocitat; o en la formulació d'equacions d'estat de la matèria nuclear en les col·lisions molt energètiques entre nuclis atòmics; o bé, encara, en l'anàlisi de models cosmològics durant les etapes en què aquests pretenen descriure transformacions molt ràpides. En definitiva, les aplicacions s'estenen des de l'estudi del món microscòpic (nuclis atòmics) fins a l'estudi de l'univers, tot passant per una escala intermitja de sistemes d'interès tecnològic i biològic. Fóra, però, massa especialitzat entrar en els detalls concrets d'aquests desenvolupaments.

Tot i això, insistiré en el problema de la relació entre Termodinàmica i mecànica estadística lluny de l'equilibri. En aquest camp es planteja, com he dit al principi, qüestions fonamentals com la definició de l'entropia i el significat de la temperatura en estats de no equilibri, o la formulació del segon principi de la Termodinàmica. Una de les dificultats rau a saber quina via, si la macroscòpica o la microscòpica, pot ser més fructífera o té més legitimitat teòrica per a abordar el repte.

Ací, ha estat precisament l'èxit enorme de l'equació de Boltzmann el que pesa ara sobre la Termodinàmica i que dificulta la utilització de mètodes termodinàmics en aquesta frontera de la física. Habitualment, se suposa que és imprescindible acudir a una descripció microscòpica, i que és impossible pensar aquestes problemes a escala macroscòpica. Per aquest motiu, la mecànica estadística de no equilibri ha avançat molt més que no pas la termodinàmica de no equilibri, ancorada aquesta darrera en la hipòtesi de l'equilibri local, que l'anàlisi microscòpica no s'està d'abandonar. Així, superar les restriccions de la hipòtesi de l'equilibri local ha esdevingut cada vegada més urgent per a la Termodinàmica.

Hom es podria demanar, però, fins a quin punt és necessari generalitzar la Termodinàmica. No n'hi hauria prou amb una metodologia microscòpica? No bastaria limitar-se a consideracions de tipus cinètic sense necessitat d'acudir a conceptes ter-

modinàmics? De fet, hi ha diverses raons que fan atractiu l'ús de la Termodinàmica. D'una banda, perquè ofereix un esquema integrador, un marc d'unificació i de comparació del més fonamental que la mecànica estadística ens descobreix en els diversos sistemes concrets i simplificats que estudia. En segon lloc, perquè els instruments de mesurament són macroscòpics. Per això, cal complementar les interessantíssimes descripcions microscòpiques, detallades i potents però massa limitades a sistemes simples i a aproximacions matemàtiques considerables, amb un estudi macroscòpic que posi de manifest les característiques comunes a tots els sistemes i el significat físic de les magnituds mesurables. Un termòmetre, mesura realment l'energia cinètica translacional mitjana de les molècules d'un gas monoatòmic sotmès a un flux de calor ? Això és especialment urgent en un moment en què els ordinadors permeten la simulació microscòpica de sistemes amb un nombre considerable de partícules i faciliten una anàlisi directa de l'evolució del sistema en condicions que seria molt difícil d'assolir en el laboratori. Però relacionar magnituds microscòpiques amb magnituds macroscòpiques és, avui, un repte epistemològic dels més notables, comparable, potser, al que en el seu temps fou la interpretació de la mesura de l'espai i del temps en els orígens de la relativitat especial, o al que fou l'anàlisi de la causalitat o la manca de causalitat en els orígens de la mecànica quàntica, i que cal resoldre tant pel que fa a la interpretació de les mesures com pel que fa a com definir operativament els correlatius observables de les simulacions d'ordinador. Tot i això, la convicció en la superioritat de la descripció microscòpica és encara tan forta, que en molts casos es creu que és d'aquest punt de vista d'on cal arribar a comprendre aquestes qüestions.

Per refer el camí del microscòpic al macroscòpic la via és clara en equilibri, però està plena de sorpreses i lluny de ser coneguda fora de l'equilibri. Pel que fa a la Termodinàmica, i especialment als seus conceptes fonamentals com l'entropia o la temperatura, la situació en aquest final de segle sembla l'oposada a la de final del segle passat. A final del segle passat, els intents d'interpretar microscòpicament l'entropia i la temperatura

d'equilibri eren vistos amb recel epistemològic. Es preferia considerar aquells conceptes en la seva puresa macroscòpica, independents d'interpretacions sobre l'existència de les quals era dubtosa. En el nostre final de segle, la mentalitat reduccionista a ultrança, que s'ha anat afeblint en altres camps, segueix encara viva en el camp obert i ple de problemes dels fenòmens allunyats de l'equilibri. La situació sembla, doncs, la inversa. Ara, s'acostuma a creure que l'única font de coneixement que il·lustrarà aquestes qüestions és la microscòpica, i que la macroscòpica ha arribat al límit de validesa amb la teoria de l'equilibri local, en què aquestes qüestions no es plantegen, però ja no té res més a dir en situacions més generals. Com a finals del segle passat, la posició més fructífera serà, probablement, aquella que combini amb sensatesa, intuïció i rigor, la riquesa dels diferents punts de vista, en lloc de les que donin per tancar des altres vies d'exploració d'aquella que proposen.

#### *6. Finals del segle XX: recuperació de les visions de conjunt*

El final del nostre segle tendeix a valorar novament un coneixement macroscòpic i amb una forta component pluridisciplinar. Cap a principis dels anys seixanta, Prigogine començà a difondre l'interès per les estructures dissipatives, és a dir, per les estructures que apareixen espontàniament en els sistemes prou allunyats de l'equilibri termodinàmic. L'exemple paradigmàtic són les estructures convectives que apareixen en un fluid viscos escalfat per sota quan el ritme d'escalfament depassa un cert valor crític. Per sota d'aquest valor, el fluid està en repòs i la calor és transportada per conducció. Per sobre del valor crític, el fluid es posa en moviment, però no pas d'una forma desorganitzada, com seria d'esperar, sinó d'una forma estructurada i ben definida. També moltes equacions químiques autocatalítiques presenten un comportament autoorganitzatiu quan es troben prou lluny de l'equilibri, i donen lloc, aleshores, a ritmes periòdics ben definits o a estructures espacials ben delimitades. A diferència de les estructures d'equilibri, com ara els cristalls, que no necessiten una aportació contínua d'energia per a perdu-

rar, aquestes estructures dissipatives necessiten per a subsistir un subministrament continu d'energia o de matèria. Per això, aquestes estructures tenen elements comuns amb les estructures biològiques i el seu estudi permet de començar a comprendre els mecanismes de la morfogènesi, és a dir, de l'aparició de formes, en biologia, tot posant de manifest així un camp comú que suscita la curiositat i l'interès de físics, químics, biòlegs i, també, d'estudiosos de les ciències socials i de la filosofia.

Cap a principis dels anys 1980, comencen a conèixer una àmplia difusió els nous estudis sobre caos determinista, també acusadament pluridisciplinars. Les equacions macroscòpiques, que forneixen en moltes situacions un model plausible del funcionament d'un sistema, basat en unes poques variables sense fonamentació microscòpica detallada, passen a posar de manifest una sèrie de característiques inesperades que res, en el nivell purament microscòpic, no faria esperar. En alguns casos, aquestes equacions tenen una interpretació microscòpica clara, com en el problema de tres cossos interactuant segons la força gravitatòria. Precisament, una de les sorpreses conceptuals més notables del caos determinista ha estat el fet que sistemes de tan sols tres graus de llibertat poden exhibir una complexitat irreductible i inesperada. D'altra banda, sistemes de naturalesa microscòpica molt diversa exhibeixen un comportament macroscòpic molt semblant, descrit per equacions fonamentalment anàlogues, de manera que els detalls microscòpics semblen força irrelevant, tal com s'esdevé en els fenòmens que tenen lloc en les proximitats dels punts crítics. Així, la idea reduccionista s'ha anat afeblint, si més no en el sentit que sigui imprescindible una justificació microscòpica de les equacions per tal de poder descriure satisfactòriament la natura. És més, el problema rau a justificar per què la informació microscòpica és, en molts casos, tan irrelevant.

Pel que fa a la biologia, ha estat l'ecologia, de tant de relleu a Barcelona, una de les branques que han insistit en la visió de conjunt, utilitzant de vegades idees i mètodes propers als de la Termodinàmica, com en els estudis del Professor Ramon Mar-

galef sobre l'estructura i la successió de poblacions. Les preocupacions pel medi ambient han suscitat també visions globals del planeta, en què els efectes sobre l'atmosfera, l'oceà o la transmissió de malalties ja no queden retallats per fronteres estatals, sinó que esclaten a escala mundial. Així, ¿podríem dir que també en aquest final de segle les idees macroscòpiques, en un cert sentit, tornen a tenir una rellevància comparable a la de finals de segle passat, tot i que incorporant, és clar, més respecte per la informació microscòpica ? Podríem dir que, després de noranta anys de reduccionisme i anàlisi es torna a dedicar interès a la síntesi, a la recuperació del món macroscòpic ?

En aquest final del nostre segle, l'entropia coneix importants renovacions. Vers 1970, Bekenstein atribueix una entropia als forats negres, mesurada per la seva àrea. Aquesta idea, basada en un teorema anterior de Hawking sobre el creixement de l'àrea dels horitzons dels forats negres, duu a atribuir a aquests una temperatura i s'avança a la idea de radiació dels forats negres, efecte estudiat per Hawking i que representa una de les conseqüències més atractives i sorprenents de la combinació entre relativitat general o teoria de la gravitació i mecànica quàntica. Pel que fa a l'entropia com a informació, trobem aquesta magnitud jugant un paper important en els estudis quantitius de la teoria del caos, que tanta atenció ha rebut darrerament, i tan mancats d'indicadors precisos, rellevants i ben definits que permetin d'avançar enllà de l'enlluernament de les descripcions qualitatives. Pel que fa a la definició microscòpica de l'entropia, els nous desenvolupaments en teoria algorítmica de la informació duen a la possibilitat de definir una entropia per a un sol microestat, en lloc de necessitar tota una estadística de diversos microestats com en la definició de Boltzmann. Això té força interès per als qui pretenem ampliar l'abast de la Termodinàmica ben enllà dels límits de l'equilibri local. Pel que fa al problema de la irreversibilitat, a la discrepància entre mecànica i termodinàmica, Prigogine subverteix la visió clàssica, segons la qual la reversibilitat mecànica representa la realitat i la irreversibilitat termodinàmica és una il·lusió dels nostres sentits per a posar de manifest que una irreversibilitat pràctica pot trobar-se també en els

sistemes mecànics, quan aquests presenten una dinàmica caòtica. En efecte, tot i la reversibilitat de les equacions de moviment, la radical limitació sobre la predictibilitat que suposa la separació exponencial de les trajectòries implica una ràpida pèrdua d'informació que impedeix precisar el camí de retorn vers l'estat de partida. I, en termodinàmica de processos irreversibles, hom intenta formular entropies fora de l'equilibri, radicalment noves en comparació amb l'entropia de l'equilibri local, i íntimament vinculades amb la dinàmica dels sistemes, en lloc de suposar una Termodinàmica donada a priori, i que posa les seves restriccions sobre la dinàmica possible del sistema. Pot ser que aquestes diverses línies de progrés convergeixin un dia en una Termodinàmica de no equilibri més profunda i potent que l'actual.

En definitiva, a finals del segle passat, la Física visqué un moment de predomini conceptual del primer principi. L'energia donava un sentit de permanència al món. La física clàssica semblava haver arribat a una culminació gloriosa capaç de resoldre tots els problemes. Les escales temporals previstes per a exhaurir les fonts energètiques semblaven dilatadíssimes. A finals del nostre segle, en canvi, la preocupació per la degradació de l'entorn, per l'exhauriment de recursos a curt o mitjà termini, l'augment d'interès per la qualitat i per la informació per damunt de la quantitat, semblen donar a l'entropia un paper emblemàtic i central.

Com a finals del segle passat, la Termodinàmica presenta una frontera oberta, en què conflueixen delicades qüestions conceptuais (formulació de la segona llei, relació entre la part i el tot), epistemològiques (què mesuren realment els instruments en situacions estacionàries allunyades de l'equilibri) i pràctiques (dispositius ràpids, miniaturitzats i potents). Per això, evocar la figura de Boltzmann en la seva frontera problemàtica en la Viena de finals de segle passat, segueix essent tan atractiu, ja que ens ajuda a ser conscients d'una problemàtica similar en el coneixement d'avui i a viure-la amb tanta passió com la que ell hi posà i que és, en definitiva, tan intensa com la que puguin tenir els artistes en la seva obra.





## REFERÈNCIES

### Referències generals

– P.W. Atkins, *La segunda ley* (Libros de Investigación y Ciencia, Barcelona, 1992).

– P. Coveney i R. Highfield, *La flecha del tiempo* (Plaza Janés, Muy Interesante, Barcelona, 1992).

– I. Prigogine i I. Stengers, *La nueva alianza* (Alianza editorial, Madrid, 1983).

– I. Prigogine i I. Stengers, *Entre el tiempo y la eternidad* (Alianza editorial, Madrid, 1992).

– J. Wagensberg, *Ideas sobre la complejidad del mundo* (Tusquets, Metatemas, Barcelona, 1985).

### Referències especialitzades

– J. Casas-Vázquez, D. Jou and G. Lebon, eds, *Recent Developments in Nonequilibrium Thermodynamics* (Lecture Notes in Physics, Springer, Berlin, 1984).

– S.R. De Groot and P. Mazur, *Non Equilibrium Thermodynamics* (North Holland, Amsterdam, 1962).

– B.C. Eu, *Kinetic theory and nonequilibrium thermodynamics* (Wiley, New York, 1992).

– P. Glansdorff and I. Prigogine, *Thermodynamic theory of stability, structure and fluctuations* (Wiley, New York, 1971).

– D. Jou, *Ecuaciones de Gibbs generalizadas i extensió de la ter-*

*modinàmica dels processos irreversibles* (Arxius de la Secció de Ciències, LXVII, Institut d'Estudis Catalans, Barcelona, 1984; Premi Eduard Fontserè 1981).

– D. Jou, J. Casas-Vázquez and G. Lebon, J. Non-Equilib Thermodyn **4** (1979) 349 ; G. Lebon, D. Jou, J. Casas-Vázquez, J. Phys A **13** (1980) 275 ; D. Jou, J. Casas-Vázquez i G. Lebon, Rep. Prog. Phys. **51** (1988) 1105.

– D. Jou, J. Casas-Vázquez and G. Lebon, *Extended Irreversible Thermodynamics* (Springer, Berlin, 1993) (Premi Ciutat de Barcelona 1993).

– I. Müller and T. Ruggeri, *Extended Thermodynamics* (Springer, Berlin, 1993).

– P. Salamon and S. Sieniutycz, eds, *Extended Thermodynamic Systems* (Taylor and Francis, New York, 1992).

– S. Sieniutycz, *Conservation laws in variational thermohydrodynamics* (Kluwer, Dordrecht, 1994).

– C. Truesdell, *Rational Thermodynamics* (Springer, New York, 1971).

### Referències històriques

– S.G. Brush, *The kind of motion we call heat: a history of the kinetic theory of gases in the 19th century* (North-Holland, Amsterdam, 1976) (2 vols).

– S.G. Brush, *Statistical physics and the atomic theory of matter, from Boyle and Newton to Landau and Onsager* (Princeton University Press, Princeton, 1983).

– C. Truesdell, *The tragicomical history of thermodynamics: 1822-1854* (Springer, New York, 1980).

– D.Jou, "Historia de la Termología hasta el siglo XIX" a *Historia de la Física hasta el siglo XIX*, i "Historia de la Termodinámica en el siglo XIX", a *Historia de la Física en el siglo XIX*, Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Madrid, 1984 i 1986, respectivament.

– K. Martinás, L. Roplyi and P. Szegedi, eds, *Thermodynamics: history and philosophy*, World Scientific, Singapur, 1991.



DISCURS DE CONTESTACIÓ

PER L'ACADÈMIC NUMERARI

EXCM. SR. DR. PERE MIRÓ I PLANS



*Excm. Sr. President*

*Excms. Srs. Acadèmics*

*Senyores i senyors:*

*Potser per aquest motiu, i perquè sovint s'associen la Física i la Química, que bo i sent disciplines diferents tenen profundes relacions, el President m'ha encarregat contestar el discurs d'ingrés del nou membre de l'Acadèmia. Realment, la fisico-química, puntal bàsic de l'enginyeria química, deu molt a la Termodinàmica.*

*El Dr. David Jou va néixer a Sitges i obtingué la Llicenciatura en ciències físiques a la Universitat Autònoma de Barcelona, on va presentar la seva tesi de doctor sobre el tema "Estudio termodinámico de mezclas fluidas con interacciones electromagnéticas", guardonada amb la qualificació de Premi Extraordinari, a l'igual que ho fou la seva llicenciatura. Ell obre la rica llista de físics sortits d'aquesta Universitat, Bellaterra, que, fets els seus estudis de llicenciatura a la UAB, obtingueren, en l'esmentada Universitat, el grau de doctor.*

*Amb aquests premis extraordinaris inicia un llarg llistat de distincions, malgrat la seva joventut. Entre aquestes, podria destacar-se el premi Eduard Fontseré de l'Institut d'Estudis Catalans, Rei Juan Carlos I per a joves investigadors, Narcís Monturiol de la Generalitat de Catalunya o el Ciutat de Barcelona de l'Ajuntament de la capital catalana.*

*Com a investigador s'especialitza des de l'inici de la seva activitat creadora en estudis en el camp de la termodinàmica, evolucionant din-*

*tre d'aquesta cap a l'estudi dels processos de no equilibri, en què continua esmerçant la seva tasca de recerca.*

*Tasca intensa que el porta a fer estades de treball en prestigiosos centres: Liège, Berlín, Montreal, Tokyo, entre d'altres i donar conferències i seminaris en els més variats punts de la geografia mundial invitat per Universitats, Societats Científiques o Congressos.*

*El seu prestigi va creant escola i són ja molts els físics que han assolit el grau de doctor, o realitzat treballs de postgrau sota el mestratge del professor Jou.*

*Els seus resultats són seguits amb veritable interès pels científics que treballen en el camp de la termodinàmica de no equilibri. Ha publicat més de cent treballs en publicacions científiques d'arreu del món, particularment estrangeres i del més alt prestigi.*

*És autor de nou llibres, alguns dels quals han estat traduïts en diversos països estrangers, com USA, o Alemanya, i capítols de molts d'altres, en col·laboració, publicats arreu del món.*

*Basti assenyalar que dos treballs: "An extension of the-local equilibrium hypothesis" (J. Phys A 13 (1980) 275-290) i "Extended irreversible thermodynamics" (Rep. Prog. Phys. 51 (1988) 1105-1179) publicats conjuntament amb el Prof. Lebon de Liège i el Prof. Casas Vázquez, el seu director de tesi, són freqüentment citats en les publicacions de l'especialitat. La primera compta amb un índex de referència bibliogràfica superior a cent i la segona ha sobrepassat la remarcable xifra de dues-centes citacions.*

*Però la personalitat del Dr. Jou desborda l'activitat investigadora i docent en els difícils temes de la termodinàmica i la seva ploma cultivava el periodisme científic en publicacions d'àmplia difusió.*

*Una personalitat tan rica, estén la seva activitat creadora a altres camps. En incorporar a la Reial Acadèmia de Doctors, un mestre de la física teòrica, ens enriqueim també amb un literat, un poeta, que pot ajuntar al seu abundós i magnífic currículum científic una àmplia*



*obra, recopilada en dotze llibres de poesia, que ha estat sovint guardonada en prestigiosos certàmens.*

\* \* \*

*El Dr. Jou ens ha exposat en el seu discurs d'entrada, el difícil i interessant tema de l'entropia en dos finals de segle, concepte que a la dificultat de manejar conjuntament un profund coneixement físic, matemàtic i químic, s'entra sovint en qüestions filosòfiques. El domini de la termodinàmica, del qual el nou acadèmic n'és mestre consumat, és la base teòrica en què s'assenten l'explicació i el desenvolupament de múltiples processos d'interès pràctic i general. A la vegada, és fascinant per l'amplitud de la validesa pels seus principis, que sovint topen en fets contradictoris al que es postula, però que un estudi aprofundit i exhaustiu dona nova confirmació a la seva validesa.*

*De la docta paraula del Prof. Jou hem seguit l'evolució d'una ciència que, nascuda a principis del segle XIX de l'estudi de les màquines tèrmiques, veritables motors de la revolució industrial, passa de considerar la problemàtica de la transformació de calor en treball a la situació actual en què els temes que aborda són d'una complexitat colpidora i a l'ensem del màxim interès per al desenvolupament de la societat en multitud de camps.*

*Dos principis simples i intuïtius, la conservació de l'energia i la impossibilitat de convertir calor en treball per mitjà d'un cicle isotèrmic, porten a definir una nova magnitud: l'entropia (del grec canvi), que ens permet formular el segon principi, vàlid solament per sistemes aïllats, dient que els processos naturals van acompanyats sempre d'un increment de l'entropia de l'univers.*

*Aquests principis produeixen una veritable revolució de la física. El primer marca la fi del calòric, el segon el sentit de l'evolució dels processos, i obren els ulls que sota aquests principis hi ha una validesa més àmplia que la seva aplicació a les màquines tèrmiques. El seu impacte desborda la física i la seva universalitat atrau l'interès dels filòsofs. Ben aviat, per aplicació de procediments matemàtics, fou possible derivar consideracions que han demostrat ésser d'importància*

*fonamental, no sols per la física, sinó també per la química i l'enginyeria.*

*Però la revolució provocada fou més profunda quan Boltzmann enfocà el problema d'interpretar l'entropia i passà de l'estudi macroscòpic en què es movien els estudis de termodinàmica, a un estudi microscòpic; a considerar els sistemes formats per partícules (àtoms o molècules). Per aquesta via arriba a establir una relació entre entropia i probabilitat de l'estat termodinàmic, que permet interpretar aquesta magnitud com una mesura del desordre molecular del sistema.*

*Boltzmann relaciona l'entropia d'un estat qualsevol d'un sistema amb al nombre de microestats compatibles en aquell macroestat amb la senzilla fórmula que és l'epitafi de la seva tomba*

$$S = k \cdot \ln W$$

*on W és el nombre dels microestats i k una constant universal.*

*Planck, Einstein, Gibbs i molts d'altres, beuen de la font que fa brollar Boltzmann i, en afegir-hi la teoria quàntica, donen interpretació a fenòmens que la física newtoniana no podia explicar. Així, impulsen el més esplendorós desenvolupament que ha viscut la humanitat. L'aportació de la termodinàmica fou decisiva per aquest gran canvi en la física cap a la fi del segle passat. La Termodinàmica assoleix, llavors, la seva maduresa. La interpretació de Boltzmann que la naturalesa tendeix cap al desordre li obre molts camins i comença a utilitzar-se en l'avaluació de la informació, en economia, en literatura, en geografia, per assenyalar aplicacions ben llunyanes del món de la física. També xoca en situacions que a primera vista contradiuen les seves interpretacions.*

*El principi que la naturalesa tendeix al desordre, a la homogeneïtat, sembla contrari a l'ordre i estructuració que observem en els sistemes biològics. Però aquesta contradicció desapareix si considerem que els sistemes biològics no són sistemes aïllats, són sistemes que intercanvien energia i matèria amb el món exterior. En sistemes no aïllats, en incloure en l'estudi el seu entorn, es pot justificar que és possible una disminució de l'entropia sempre que la de l'ambient augmenti. El*

*comportament biològic és compatible, doncs, amb la segona llei, però no explica l'estructuració que comprovem en els éssers vivents.*

*L'explicació la dóna la termodinàmica en considerar que els sers vivents no estan en equilibri, sinó fora de l'equilibri. Entrem en un nou terreny, el de la termodinàmica fora de l'equilibri, camps en el qual el nou acadèmic gaudeix de prestigi internacional. En ella, s'ha d'introduir la variable temps, és a dir, estudiar els factors cinètics.*

*La hipòtesi de l'equilibri local ha estat la base que permeté abordar l'estudi de situacions no explicades encara, sense introduir cap concepte nou. Aquest plantejament va produir resultats importants que han merescut el premi Nobel de Química a dos investigadors: Onsager (1968) i Prigogine (1977).*

*Els avenços actuals de la tecnologia posen nous reptes a la termodinàmica, que ha d'estudiar estats cada cop més allunyats de l'equilibri. Com definir l'entropia en aquestes situacions? Aquest és precisament el centre dels treballs de recerca del nou acadèmic. Les seves teories obren un camí per comprendre qüestions bàsiques que no podia abordar la termodinàmica clàssica.*

*El Dr. Jou ens ha exposat com l'èxit de Boltzmann portà la termodinàmica per noves rutes i traspassà a altres camps de la física la seva metòdica d'entrar a l'estudi del nivell microscòpic. Aquesta situació, juntament amb les possibilitats increïblement poderoses que avui dia posseeix la ciència d'escrutar el més íntim dels sistemes, pesen com una llosa per enfocar l'estudi dels nous problemes abordats emprant els principis macroscòpics que nodrien la termodinàmica clàssica. S'ha de buscar un procediment que permeti relacionar magnituds microscòpiques i macroscòpiques i faci avançar en la interpretació de fenòmens, particularment en estats lluny de l'equilibri.*

*Som a la fi d'un nou segle. La revalorització de l'estudi macroscòpic en termodinàmica, amb el suport de les modernes tècniques experimentals permeten noves explicacions a fenòmens que xocaven amb els principis fins ara utilitzats. La teoria de les estructures dissipatives explica fenòmens d'aparició d'ordre contraris al que s'hauria d'esperar i que la*

*termodinàmica aplicada a sistemes lluny de l'equilibri permet explicar. Aquestes estructures han resultat de gran utilitat per explicar l'ordre que observem en els éssers vius i dóna resposta a la contradicció que representava aquesta estructuració en front del desordre termodinàmic de sistemes aïllats. Els éssers vius no són sistemes aïllats i la seva entropia pot disminuir si augmenta suficientment la del seu entorn. L'aparent contradicció amb el segon principi desapareix. Gràcies a un estudi coordinat de diferents branques de la ciència s'explica el fenomen.*

*L'estudi de sistemes lluny de l'equilibri ens porta a trobar i explicar estructures ordenades. Si continuem allunyant-nos de l'equilibri, la complexitat de les estructures augmenta i l'ordre ja no es pot reconèixer i apareix una estructura caòtica a escala macromolecular. També en aquesta estructura caòtica s'han descobert recentment certes regularitats.*

*La introducció dels atractors i els fractals són nous intents per establir, amb col·laboració pluridisciplinar, de la termodinàmica i altres ciències, una termodinàmica de no equilibri aplicable a aquests fenòmens.*

*El Dr. Jou ens ha portat a la fi del segle actual i constatem que els mètodes que introduí la termodinàmica per interpretar l'entropia i que revolucionaren la física a finals del segle XIX estan en revisió. Els plantejaments macroscòpics es tornen a prendre en consideració i, juntament amb els grans avenços de la tecnologia, que fan possible endin-sar-se i conèixer la situació i evolució de sistemes més complicats, en col·laboració amb altres disciplines científiques es van desenvolupant i consolidant una Termodinàmica lluny de l'equilibri que permet atacar el coneixement i l'explicació de fenòmens que estan en la base de la mateixa vida i del desenvolupament de la humanitat.*

*Enhorabona, Dr. Jou, pel vostre ingrés a la Reial Acadèmia de Doctors. Felicitació també a la institució que, amb l'elecció del nou acadèmic, s'enriqueix amb un molt valuós cultiuador d'una branca tan important de la ciència com és la física, que no tenia un representant en el seu si. En nom de la Reial Acadèmia de Doctors i en el meu propi, sigueu benvingut.*

*Barcelona, març 1996*

## ÍNDIX

### L'ENTROPIA EN DOS FINALS DE SEGLE

<b>Discurs d'ingrés</b> .....	7
1. Els principis de la Termodinàmica clàssica .....	9
2. Finals del segle XIX: atomisme i entropia .....	12
3. Un segle de reduccionisme .....	17
4. La Termodinàmica fora de l'equilibri .....	19
5. Necessitat d'una nova Termodinàmica fora de l'equilibri .....	22
6. Finals del segle XX: recuperació de les visions de conjunt .....	26
<b>Referències</b> .....	31
<b>Discurs de contestació</b> .....	35

## NOVES PUBLICACIONS DE LA REIAL ACADÈMIA DE DOCTORS

*Directori 1991.*

*Los tejidos tradicionales en las poblaciones pirenaicas* (Discurs de promoció a acadèmic numerari de l'Excm.Sr. Eduardo de Aysa Satué, Doctor en Ciències Econòmiques, i contestació per l'Excm.Sr. Josep Antoni Plana i Castellví, Doctor en Geografia i Història), 1992.

*La tradición jurídica catalana* (Conferència magistral del acadèmic de número Excm.Sr. Josep Joan Pintó i Ruiz, Doctor en Dret, en la Solemne Sessió d'apertura de curs 1992-93, que fou presidida per SS.MM. el Rei Joan Carles I i la Reina Sofia), 1992.

*La identidad étnica* (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Angel Aguirre Baztan, Doctor en Filosofia i Lletres, i contestació per l'Excm.Sr. Josep M. Pou d'Avilés, Doctor en Dret), 1993.

*Els laboratoris d'assaig i el mercat interior; Importància i nova concepció* (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Pere Miró i Plans, Doctor en Ciències Químiques, i contestació per l'Excm.Sr. Josep M<sup>a</sup> Simón i Tor, Doctor en Medicina i Cirurgia), 1993.

*Contribución al estudio de las Bacteriemias* (Discurs d'ingrés de l'acadèmic corresponent Il.lm.Sr. Miquel Marí i Tur, Doctor en Farmàcia, i contestació per l'Excm.Sr. Manuel Subirana i Cantarell, Doctor en Medicina i Cirurgia), 1993.

*Realitat i futur del tractament de la hipertròfia benigna de pròstata* (Discurs de promoció a acadèmic numerari de l'Excm.Sr. Joaquim Gironella i Coll, Doctor en Medicina i Cirurgia, i contestació per l'Excm.Sr. Albert Casellas i Condom, Doctor en Medicina i Cirurgia i President del Col.legi de Metges de Girona), 1994.

*La seguridad jurídica en nuestro tiempo. ¿Mito o realidad?* (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. José Méndez Pérez, Doctor en Dret, i contestació per l'Excm.Sr. Angel Aguirre Baztán, Doctor en Filosofia i Lletres), 1994.

*La transició demogràfica a Catalunya i a Balears* (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Tomàs Vidal i Bendito, Doctor en Filosofia i Lletres, i contestació per l'Excm.Sr. Josep Ferrer i Bernard, Doctor en Psicologia), 1994.

*L'art d'ensenyar i d'aprendre* (Discurs de promoció a acadèmic numerari de l'Excm.Sr. Pau Umbert i Millet, Doctor en Medicina i Cirurgia, i contestació per l'Excm.Sr. Agustín Luna Serrano, Doctor en Dret), 1995.

*Sessió necrològica* en record de l'Excm.Sr. Lluís Dolcet i Buxeres, Doctor en Medicina i Cirurgia i Degà emèrit de la Reial Acadèmia de Doctors, que morí el 21 de gener de 1994. Enaltíren la seva personalitat els acadèmics de número Excms.Srs.Drs. Ricard García Vallès, Josep M<sup>a</sup> Simón i Tor i Albert Casellas i Condom. 1995.

*La Unió Europea com a creació del geni polític d'Europa* (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Jordi Garcia-Petit i Pàmies, Doctor en Dret, i contestació per l'Excm.Sr. Josep Llorit i Brull, Doctor en Ciències Econòmiques), 1995.

*La explosión innovadora de los mercados financieros* (Discurs d'ingrés de l'acadèmic corresponent Il.lm.Sr. Emilio Soldevilla García, Doctor en Ciències Econòmiques i Empresariales, i contestació per l'Excm.Sr. José Méndez Pérez, Doctor en Dret), 1995.

*La cultura com a part integrant de l'Olimpisme* (Discurs d'ingrés com acadèmic d'honor de l'Excm.Sr. Joan Antoni Samaranch i Torelló, Marquès de Samaranch, i contestació per l'Excm.Sr. Jaume Gil i Aluja, Doctor en Ciències Econòmiques), 1995.

*Medicina i Tecnologia en el context històric* (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Felip Albert Cid i Rafael, Doctor en Medicina i Cirurgia, i contestació per l'Excm.Sr. Angel Aguirre Baztán, Doctor en Filosofia i LLetres) 1995.

*Els sòlids platònics* (Discurs d'ingrés de l'acadèmica numerària Excma.Sra. Pilar Bayer i Isant, Doctora en Matemàtiques, i contestació per l'Excm.Sr. Ricard Garcia i Vallès, Doctor en Dret) 1996.

*La normalització en Bioquímica Clínica* (Discurs d'ingrés de l'acadèmic numerari Excm.Sr. Xavier Fuentes i Arderiu, Doctor en Farmàcia, i contestació per l'Excm.Sr. Tomàs Vidal i Bendito, Doctor en Geografia) 1996.

La Reial Acadèmia, bo i respectant com a criteri d'autor les opinions exposades en les seves publicacions, no se'n fa responsable ni solidària.

© Reial Acadèmia de Doctors  
Disseny: Anna Bosch i Baltasar  
Impressió: Impremta Baltasar 1861  
Tiratge: 350 exemplars.

Dipòsit legal: B-13.669-1996









REAL ACADEMIA DE DOCTORS

—Publicacions—