

Reporte sobre el estudio y obtención de monocristales sintéticos de cuarzo a partir de mineral cubano

Carlos Arencibia del Risco, Rolando Rodríguez Macías, Elsa Hernández, Juan Fuentes Betancourt, Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica. (IMRE). Universidad de La Habana

RESUMEN

Se obtuvieron cristales de cuarzo sintético por el método hidrotermal de crecimiento y un alto valor en el factor Q . Desde este punto de vista fue valorado el yacimiento *Cacahual* veta dos.

ABSTRACT

Sinthetic quartz crystals grown by the hidrothermal method and having a high value of Q factor were obtained. From these results, the number two vein from the *Cacahual*'s mineral deposit was evaluated.

INTRODUCCIÓN

El cuarzo monocristalino juega un papel importante como materia prima en la confección de dispositivos ópticos y electrónicos, al servir de base a todo tipo de comunicaciones terrestres, submarinas o cósmicas y en su utilización para la construcción de sensores piezorresonantes.

El crecer progresivo de la producción de estos dispositivos demanda un enorme incremento de la producción de cuarzo piezoeléctrico sintético. Esta producción se encuentra en manos de unos pocos países y su adquisición resulta cada día más difícil y costosa en el mercado internacional.

Cuba cuenta con ricos yacimientos de mineral de cuarzo de buena calidad. Actualmente se realizan aceleradamente los primeros pasos para su adecuada explotación y convertirlos en fundamento de distintos renglones industriales, entre ellos la industria electrónica, a la cual le será posible emprender la construcción de diferentes dispositivos para su uso nacional y crear nuevas soluciones para el ingreso de divisas al país.

Por ello, en el Laboratorio de Crecimiento y Purificación del IMRE (U.H.), se comenzó el estudio de la obtención de monocristales sintéticos de cuarzo con mineral cubano.

DESARROLLO

Para la obtención de monocristales sintéticos de cuarzo se utiliza el método hidrotermal de crecimiento [1-8]. La síntesis hidrotermal se utiliza con solventes acuosos bajo altas temperaturas y presiones para disolver y cristalizar materiales que son relativamente insolubles bajo condiciones ordinarias como es el caso del cuarzo [9].

El proceso es realizado en autoclaves capaces de alcanzar estas altas presiones y temperaturas y de no corroerse en presencia de mineralizadores alcalinos. Los detalles del diseño y construcción de la autoclave que fue necesario construir se reportan en otro trabajo.

El sistema de crecimiento está dividido por un diafragma horadado en dos regiones isotérmicas y cargado con mineral de cuarzo y solución alcalina; en la región inferior o zona de disolución se sitúa el material de cuarzo y en la región superior o zona de cristalización se sitúan semillas monocristalinas. En la primera zona se disuelve el material nutriente de cuarzo y se satura la solución, la cual es transportada a la zona de cristalización por la presencia de un gradiente de temperatura establecido entre ambas regiones, de tal manera que la zona menos caliente se corresponda con la zona de cristalización. La solución saturada que se transporta a la región de cristalización se sobresatura y el soluto cristaliza en las semillas. Las semillas son monocristales en forma de láminas adecuadamente orientadas y cortadas.

Los parámetros de control del proceso son las temperaturas de disolución y cristalización, gradiente de temperatura, por ciento de llenado de la autoclave con la solución, concentración del mineralizador, por ciento de abertura del diafragma y presión, todos los cuales determinan la velocidad de crecimiento del cristal. Estos parámetros han de irse ajustando para un material nutriente en particular, para tener las condiciones óptimas que aseguren un control satisfactorio de la velocidad de crecimiento, lo cual garantiza una mayor calidad en la estructura

cristalina de los cristales crecidos [10]. Esta velocidad de crecimiento también puede verse afectada por la presencia de impurezas en el cuarzo [13-14], pero en nuestro caso no fue una consideración importante a tener en cuenta por contar con un mineral de alta pureza.

Luego de diseñar y construir una autoclave para investigaciones de laboratorio, se realizaron varios crecimientos con mineral de cuarzo cubano proveniente del yacimiento *Cacahual* veta 2. Se utilizaron semillas orientadas longitudinalmente sobre el eje y con la calidad cristalina requerida para no introducir defectos al cristal crecido. El crecimiento se produce preferencialmente sobre el plano (0001) de mayor velocidad de crecimiento.

La Tabla 1 muestra los resultados y condiciones de operación en la autoclave. Existen diversos mineralizadores a utilizar [16-18], pero dada la pureza del mineral de cuarzo utilizado se seleccionó una combinación de hidróxido de sodio y carbonato de sodio. Un aumento considerable en el valor del factor Q se alcanzó a partir del tercer crecimiento con la sustitución del nitrato de litio por el nitrito de litio como parte del mineralizador en la solución. Estudios experimentales anteriores tienen comprobado este hecho [19].

CRECIMIENTOS	No. 1	No. 2	No. 3	No. 4
PARAMETROS				
Concentración del Mineralizador.	NaOH (0.75M) CO ₃ Na ₂ (1%) NO ₂ Li (1F)		NaOH (1M) CO ₃ Na ₂ (1%) NO ₂ Li (1F)	
Por ciento de llenado (%)	80	80	80	80
Abertura del diafragma (%)	6	6	6	6
Temperatura de Cristalización (°C)	330	344	345	340
ΔT (°C)	40	30	25	30
Velocidad de crecimiento (mm/día)	0.8	0.8	0.7	0.6
Q ($\times 10^6$)	0.8-0.9	1.4-1.5	2.4-2.9	3.4-3.8

Tabla 1. Parámetros de operación de la autoclave y valores del factor Q obtenido en los cristales crecidos.

Para este mineral se establecieron condiciones satisfactorias para el crecimiento de monocristales, las mismas aparecen en la Tabla 1 indicadas para el crecimiento número cuatro. La temperatura fue elevada a razón de 56 °C/h y el gradiente se estableció con velocidad de 3 °C/h; de esta forma se evitan inversiones indeseables del gradiente durante el período de calentamiento.

En el crecimiento número 4 se obtuvieron cristales de muy buena transparencia, longitud de 140 mm y elevado valor en el factor Q, el cual expresa indirectamente la calidad de la estructura cristalina. Este factor fue determinado con el auxilio de la técnica de absorción infrarroja, realizando mediciones de la absorción para dos longitudes de onda cercanas en muestras de 0.7 mm de espesor. Este método resulta rápido y efectivo y así es reportado en la bibliografía [20]. Las mediciones se realizaron a lo largo de los cristales, por ello en la Tabla 1 aparecen rangos de valores para el factor Q. La Foto 1 muestra uno de los monocristales obtenidos.

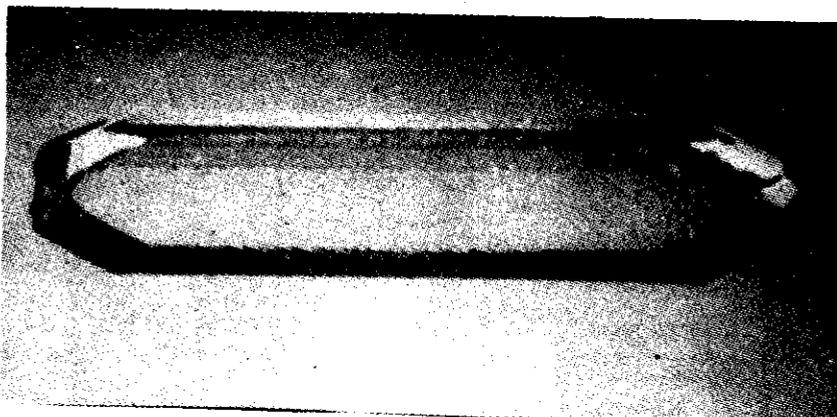


Foto 1. Uno de los monocristales crecidos.

Desde el punto de vista cristalográfico no se ha completado el estudio cuantitativo de la calidad de la estructura cristalina de estos monocristales. Queda pendiente el estudio topográfico de sus imperfecciones e inclusiones que ordinariamente se encuentran en la elaboración de estos cristales sintéticos [21-23], pero comercialmente un elevado valor de Q garantiza su utilidad para la construcción de dispositivos puesto que el mismo caracteriza cualitativamente su calidad estructural.

CONCLUSIONES

Se realizó la investigación del crecimiento hidrotérmal de cuarzo sintético y se obtuvieron monocristales con muy buena transparencia y elevado valor en el factor Q, en crecimientos de 30 días de duración cada uno.

Los resultados muestran la efectividad de la convección de la solución producto de los gradientes de temperatura escogidos y demás parámetros de control del proceso seleccionados.

El mineral de cuarzo de la veta 2 del yacimiento *Cacahual* se recomienda para la elaboración de monocristales sintéticos y se sugieren condiciones de crecimiento como las que indica la última columna de la Tabla 1.

BIBLIOGRAFÍA

- 1) Laudise, R. A. (1959). *Chemical. Eng. Progress*, vol. 55, No.5, p55-39.
- 2) Lias, N. C. (1973). *J. Cryst. Growth*. vol. 18, No. 1. p 1-6.
- 3) Walker, A. C. (1975). *Ind. and Eng. Chemistry*. Vol. 46, No. 8, p 1670-1676.
- 4) Larkin, J. J. (1982). *J. Cryst. Growth*. Vol. 60, p 115-121.
- 5) Moriva, K. (1982). *J. Cryst. Growth*. Vol. 58, p 115-121.
- 6) Armington, F. (1985). *J. Cryst. Growth*. Vol. 71, p 799-802.
- 7) Ballman, A.A. (1966). *Applied Physics Letters*. Vol. 8, No. 2, p 53-54.
- 8) Walker, A. C. (1950). *Ind. and Eng. Chem*. Vol. 42, No. 7, p 1369-1375.
- 9) Gilman, J. (1966). *The art and science on crystal growth*. Third printing. New York. Editor: John Wiley & Sons.
- 10) Chakraborty, D. (1977). *J. Cryst. Growth*. Vol. 41, No. 1, p 177-180.
- 11) Armington, A. (1975). *J. Cryst. Growth*. Vol. 75, No. 1, p 122-125.
- 12) Laudise, R. A. (1965). *J. Phys. Chem. Solid*. Vol. 26, p 1305-1308.
- 13) Armington, A. (1980). *J. Cryst. Growth*. Vol. 49, No. 5, p 739-742.
- 14) Hosaka, M. (1981). *J. Cryst. Growth*. Vol. 53, No. 3, p 544-546.
- 15) Hosaka, M. (1980). *J. Cryst. Growth*. Vol. 52, No. 6, p 837-842.
- 16) Hosaka, M. (1986). *J. Cryst. Growth*. Vol. 75, p 473-480.
- 17) Annamalai, N. (1982). *Indian Journal of Tech*. Vol. 20, No. 2 p 396-402.
- 18) Sawyer, B. (1971). *IEEE Trans. on Sonics and ultrasonics.*, Vol. su-19, No. 1, p 41-44.
- 19) Bye, K. (1979). *J. of Materials science*. Vol. 14, No. 4, p 800-810.
- 20) Spencer, W. J. (1966). *J. of Applied Phys*. Vol. 37, No. 2, p 549-553.
- 21) Hosaka, M. (1986). *J. of Cryst. Growth*. Vol. 78, p 413-417.

Diseño y construcción de una autoclave para crecimientos de monocristales por el método hidrotermal

Carlos Arencibia del Risco, Rolando Rodríguez Macías, Elsa Hernández, Juan Fuentes Betancourt, Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica (IMRE), Universidad de La Habana.

RESUMEN

Se diseñó y construyó una autoclave investigativa de laboratorio para realizar crecimientos de cristales por el método hidrotermal. La misma es capaz de soportar altas temperaturas y presiones y es regulada por un sistema computarizado.

ABSTRACT

A research autoclave to grow crystals by the hydrothermal method was designed and constructed. Being able to resist high temperatures and pressures and it is regulated by a computerized system.

INTRODUCCIÓN

El cuarzo monocristalino tiene gran importancia en la fabricación de diferentes e importantes dispositivos ópticos y electrónicos. El mismo no abunda en la naturaleza, lo que hace necesario el crecimiento de monocristales sintéticos a partir del mineral de cuarzo.

El método utilizado para el crecimiento de monocristales sintéticos de cuarzo es el hidrotermal, el cual es una variante del crecimiento por soluciones [1-2]. Con la utilización de altas presiones, presencia de soluciones alcalinas y altas temperaturas, se logra disminuir consi-

derablemente la solubilidad del cuarzo y de esta forma se hace posible la obtención de monocristales [3-5].

Para realizar el crecimiento se requiere de un equipo que debe soportar altas presiones, temperaturas relativamente elevadas y además no corroerse en presencia de soluciones alcalinas; a este equipo se le denomina autoclave. Diversos estudios se han realizado en cuanto al diseño y construcción del mismo así como de su sellaje [6-10].

Con el objetivo de disponer de un equipo que nos permitiera emprender el estudio del crecimiento hidrotermal de monocristales sintéticos de cuarzo, se diseñó y construyó una autoclave de laboratorio capaz de trabajar en el régimen requerido.

DESARROLLO

Nos propusimos construir una autoclave con cámara interior de 50 mm de diámetro y 720 mm de longitud, así como que soportara una presión interna de 2000 Kgf/cm², a una temperatura de trabajo comprendida entre los 300 - 400 °C, teniendo en cuenta que el crecimiento debía producirse en un medio básico.

La autoclave consiste en una cámara cilíndrica de fuertes paredes dividida en dos regiones por un diafragma. La Figura 1 muestra un esquema del diseño. La región inferior o de disolución se encuentra rodeada por un horno cilíndrico y la región superior o de cristalización por otro horno independiente, con los cuales se establece un gradiente de temperatura entre ambas regiones. Cada zona lleva dispuesto un termopar de cromel-alumel para el registro de la temperatura. Además, cuenta con un soporte para las semillas y una cesta para el nutriente, o sea, el mineral de cuarzo policristalino de partida.

En la región del diafragma, las regiones de cristalización y disolución se encuentran aisladas térmicamente. Alrededor de la autoclave se dispusieron alerones de disipación térmica sostenidos por una brida. Este dispositivo favorece establecer el gradiente térmico.

El diafragma se mantiene sujeto al soporte de las semillas y admite ser intercambiable, disponiéndose de un juego de estos con orificios horadados entre 5 -8 % del total de su área.

Para el sello de la autoclave se seleccionó el diseño Bridgman modificado [6], pues es capaz de soportar presiones por encima de los 6000 Kgf/cm².

El diseño de construcción fue realizado bajo los criterios de la ASME, una sociedad de prestigio internacional dedicada a elaborar las Normas de construcción de recipientes de presión; también se utilizó

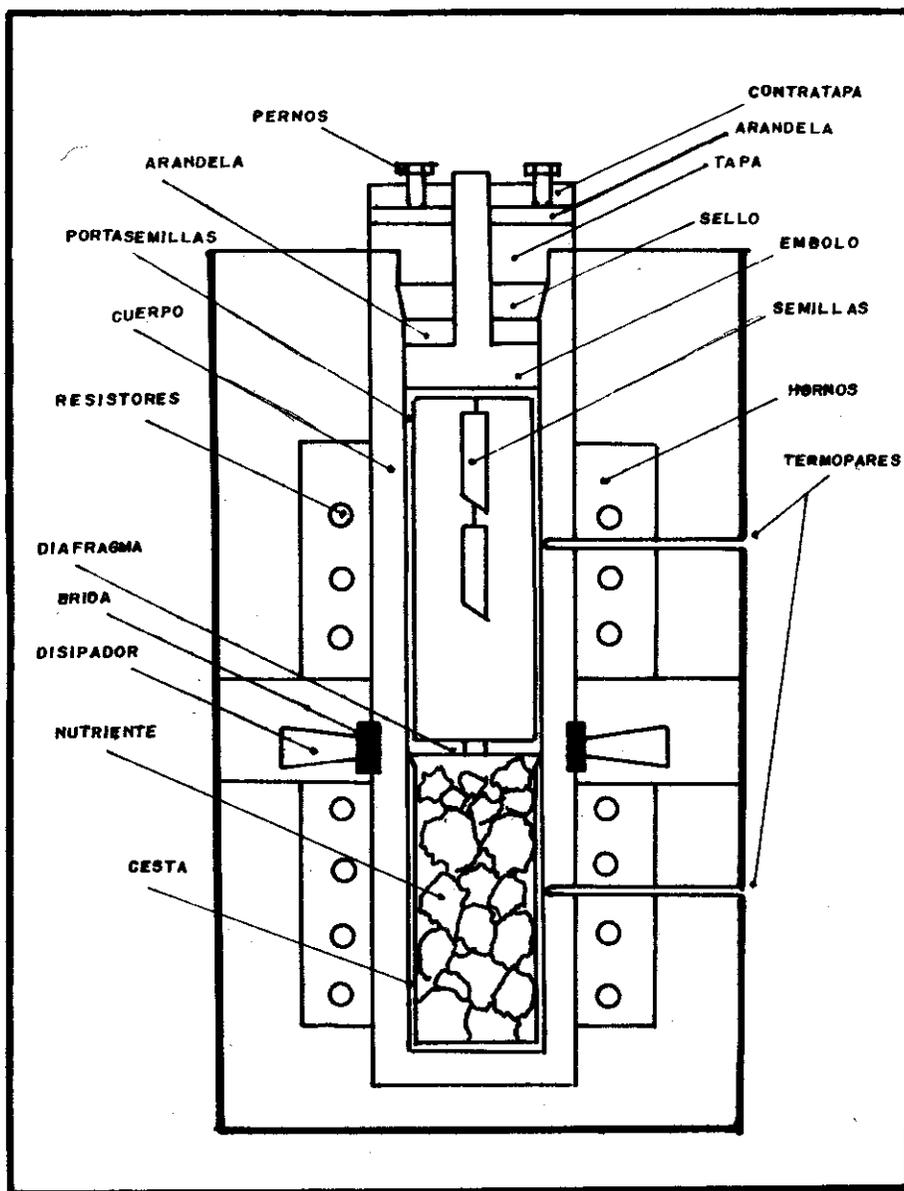


Figura 1. Esquema de la autoclave construida.

el criterio de Haman recomendado por Laudise, constructor de la primera planta piloto para el crecimiento de cuarzo sintético.

Se utilizó la aleación 1X17H2 por ser termoresistente y termorrefractaria, con resistencia a la tracción de 11000 kgf/cm^2 , límite de fluencia de 800 kgf/cm^2 y un 10 % de elongación [11].

Los hornos tabulares se construyeron sobre moldes de cerámica, con suficiente recubrimiento aislante dispuesto de tal forma que contribuyera a obtener el perfil de temperatura deseado.

Se realizaron estudios del perfil de temperatura disponiendo termopares interiores respectivamente en las zonas de disolución y cristalización de la autoclave. La Figura 2 muestra el perfil de temperatura.

Posteriormente se estudió y estableció la correspondencia en la medición de la temperatura con termopares dispuestos en el cuerpo de la autoclave. A partir de entonces resultó mucho más simple el diseño de la tapa de la autoclave al ser innecesario introducir los termopares interiormente a través de la misma.

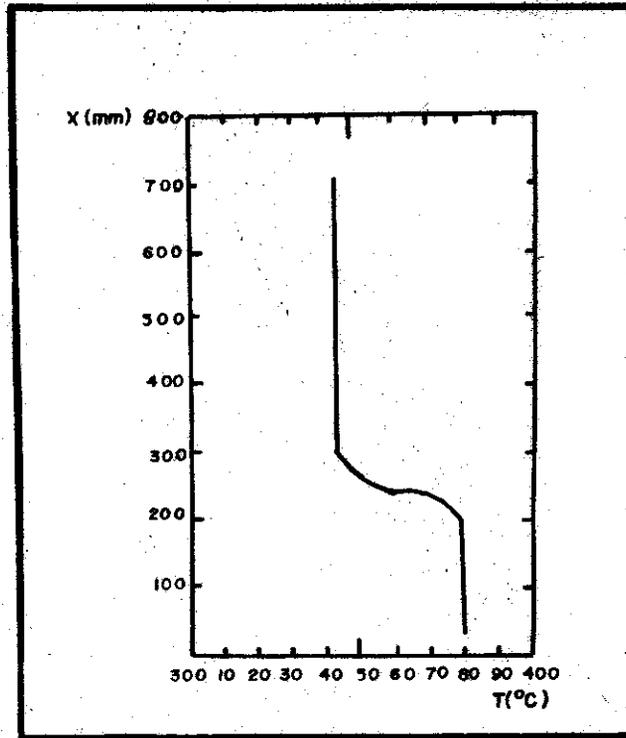


Figura 2. Perfil de temperatura.

Este perfil puede ser modificado fácilmente mediante cualquiera de las siguientes alternativas o en combinación de ellas:

- Variando la potencia de alimentación eléctrica a los hornos.
- Con desplazamientos relativos en la posición de ambos hornos.
- Variando el aislamiento térmico propio de los hornos.

De esta forma, pueden realizarse variaciones sin mucha dificultad del gradiente de temperatura entre ambas regiones de la autoclave, en el caso de que le sea difícil al sistema de control de la temperatura establecerlo.

La Figura 3 muestra el sistema de control de la temperatura utilizado, diseñado sobre la base de una pequeña computadora de 64 K Toshiba HX-10D acoplada a un bloque de control de la alimentación regulado por tiristores a través de una interfaz. Los datos de los distintos parámetros del crecimiento son introducidos a través del teclado alfanumérico y el

proceso se monitorea en una pantalla de TV. En el rango de trabajo el control aprecia variaciones en la temperatura de ± 2 °C. Si bien esta precisión no resulta totalmente satisfactoria, la experiencia demostró la posibilidad de ejecutar trabajos de crecimientos bajo la misma.

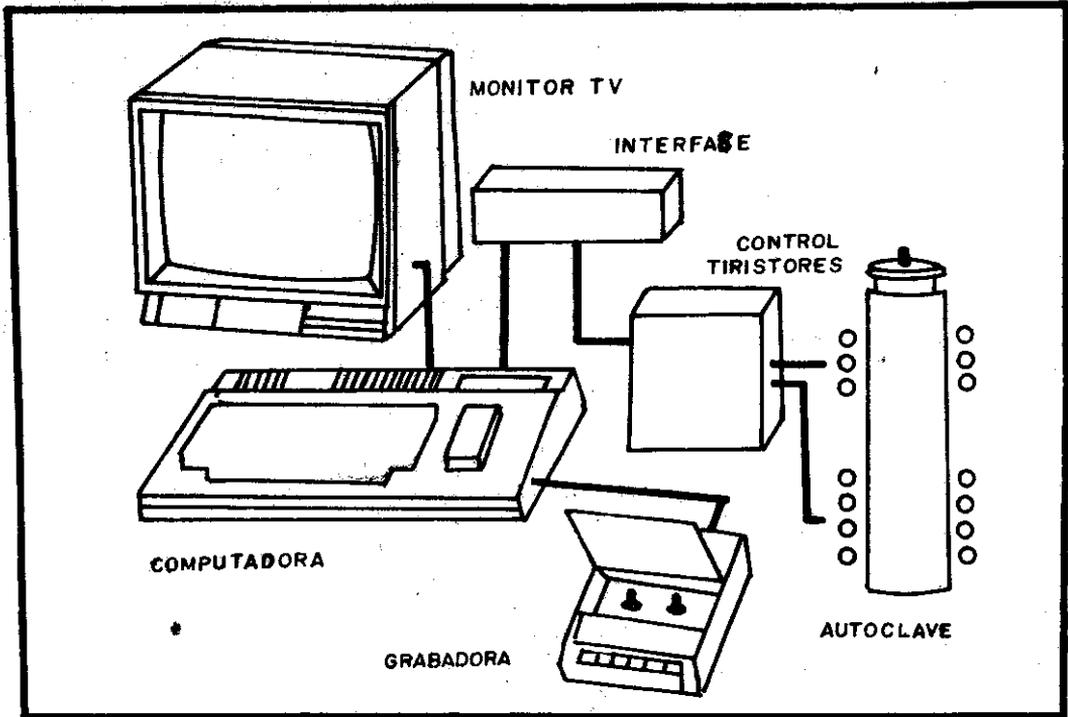


Figura 3. Esquema del sistema de control de temperatura de la autoclave.

En nuestro sistema, esta precisión se encuentra limitada por el conversor analógico-digital de 8 bit utilizado. Esta deficiencia puede ser rápidamente mejorada con la utilización de un conversor de mayor número de bit de resolución.

En el programa de ejecución empleado se estableció un régimen de calentamiento como el que muestra la Figura 4. El período de crecimiento se dividió en 5 intervalos. En el intervalo t_0-t_1 se eleva simultáneamente la temperatura de ambos hornos desde la temperatura ambiente hasta el punto t_1T_1 correspondiente a la temperatura de cristalización deseada. La experiencia demuestra la conveniencia de esta forma inicial de calentamiento para evitar inversiones del gradiente de temperatura o gradientes inicialmente indeseables que afecten la semilla usada en el crecimiento. En el intervalo t_1-t_2 el horno de la zona de disolución alcanza su temperatura de trabajo. En el intervalo t_2-t_3 se establece el gradiente de temperatura deseado en forma estable. Opcionalmente pueden utilizarse los intervalos de enfriamiento t_3-t_4 y t_4-t_5 pero la experiencia ha dictado que el sistema puede dejarse enfriar libremente.

Este programa de trabajo nos resulta muy fiable y cómodo de operar, a diferencia de programas elaborados en otros intentos [12].

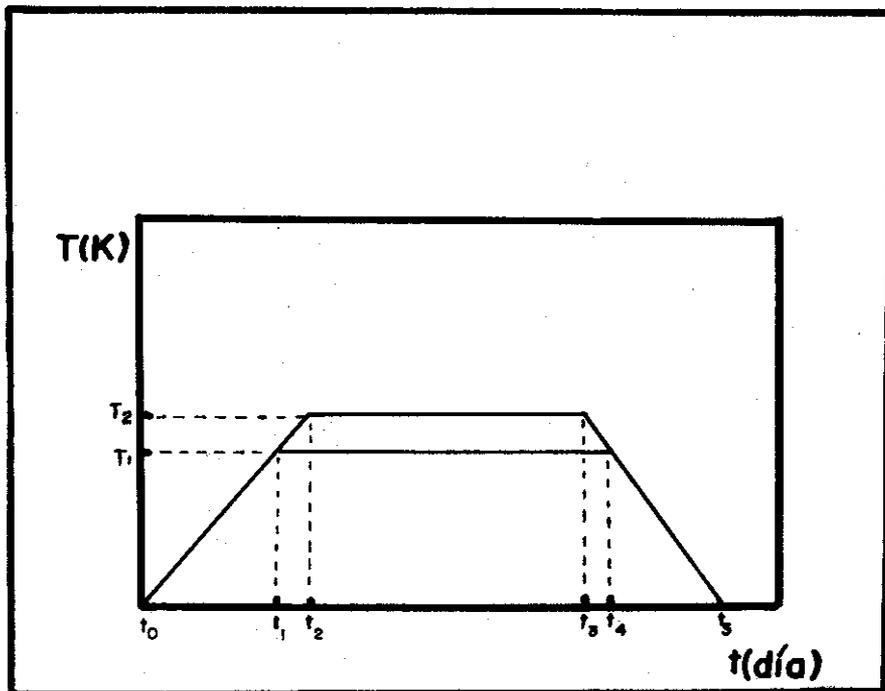


Figura 4. Régimen de calentamiento de la autoclave.

El volumen de trabajo de la autoclave es de un litro y como se dijo anteriormente, permite con facilidad realizar variaciones en el gradiente de temperatura entre las zonas de disolución y cristalización. La autoclave puede trabajar continuamente a $400\text{ }^{\circ}\text{C}$ y 2000 kgf/cm^2 de presión.

Luego de varios experimentos, en el equipo se logró obtener monocristales de alfa cuarzo con alta calidad cristalina, lo cual posteriormente será reportado.

CONCLUSIONES

Se logró la construcción satisfactoria de una autoclave investigativa de laboratorio con diseño propio que ha demostrado su aptitud para realizar crecimientos hidrotermales de cuarzo y que satisface las condiciones de seguridad necesarias, a un costo aproximado de unos 500 pesos (sin incluir el sistema de control de temperatura, capaz de gobernar 4 autoclaves de este tipo simultáneamente). Por otra parte, la autoclave es susceptible de utilizar para otros crecimientos de cristales como por ejemplo de piedras preciosas, puesto que es capaz de soportar hasta las 6000 kgf/cm^2 de presión.

AGRADECIMIENTOS

Al concluir el objetivo de este trabajo, es decir el diseño y construcción de una autoclave para el crecimiento hidrotermal a escala de laboratorio, deseamos dejar patente en esta publicación nuestro profundo agradecimiento a los compañeros Ing. Alberto Victorero por su atención en cuanto al diseño y construcción de la autoclave y al C.Dr. Manuel Calviño por realizar el diseño y construcción de la interface y del programa de ejecución para el control automático de la temperatura.

BIBLIOGRAFÍA

- 1) Gilman, J.J. (1966). *The art and science on growing crystals*. Thid printing. New York. Editor. John Willey & Sons.
- 2) Laudise, R. A. (1959). *Chemical Eng. Progress*, Vol. 55, No. 5, p. 55 59.
- 3) Walker, A. C. (1950). *Ing. Eng. Chem.*, Vol. 42, No. 7, p 1369.
- 4) Lias, N. C. (1976). *J. Cryst. Growth*, Vol. 18, p 1-6.
- 5) Laudise, R. A. (1961). *J. Phys. Chem.*, Vol. 65, No. 8, p 1396.
- 6) Gasche, F. (1956). *Ing. Eng. Chem.*, Vol. 48, No. 5.
- 7) Freeman, J. W. (1956). *Ing. Chem.*, Vol. 48, No. 4.
- 8) Mickevics, E. J. (1956). *Ing. Eng. Chem.*, Vol. 48, No. 5.
- 9) Kennedy, G. C. (1950). *Am. J. Sci.*, Vol. 248, p 1540.
- 10) Borisov, M. (1981). *Bulgarian Journal of Physics*, Vol. 6, No. 6.
- 11) Autores Varios (1965). *Aceros Soviéticos*. Editorial: Instituto Cubano de Desarrollo de Maquinarias.
- 12) Bhattacharyya, R. K. (1974). *Computerized process control system for the growth of synthetic quartz crystals*. U. S. patent 3.805.044.

Recibido/14/2/1991

Algunos aspectos sobre el incremento de tareas y habilidades en el laboratorio de Física Cuántica

R. Soto, E. Marín y M. Hernández, Dpto. Física General. Facultad de Física, Universidad de La Habana

RESUMEN

En este trabajo se analiza cómo lograr el mejoramiento del proceso de enseñanza en el laboratorio docente mediante la introducción de tareas concernientes a la adquisición y procesamiento de espectros de radiación gamma, usando un analizador multicanal diseñado y construido con fines docentes.

ABSTRACT

The analysis of improving the accomplishment of the educational process at the laboratory, by means of the introduction of tasks which involve data acquisition and processing of gamma radiation spectrum, using a multi channel analyzer, designed and constructed for teaching purposes, has been done in this paper.

INTRODUCCIÓN

La concepción con carácter de sistema, inherente a la formación experimental del egresado de la especialidad de Física, exige que aspectos tales como el uso rutinario de la teoría de errores, la manipulación de instrumentos de medición, el trabajo con las unidades internacionales y el tratamiento estadístico de los datos, entre otros, /1/ constituyan elementos consustanciales a esta forma de enseñanza.

El presente trabajo tiene por objeto discutir los aspectos concernientes al incremento de habilidades y tareas en el laboratorio docente mediante la optimización de recursos experimentales y la activación del conocimiento, en el marco de la asignatura Física Cuántica, la cual, por su diseño y organización, contiene elementos de la Física Atómica y Nuclear respectivamente.

DESARROLLO

Considerando por una parte la importancia de familiarizar al estudiante con el uso de sistemas analizadores multicanales, cuyo marco de utilización no es exclusivo de los experimentos nucleares, y por la otra, el hecho de que tal instrumentación es privativa para la mayoría de los laboratorios docentes por su alto costo, fue desarrollada una interfaz /2/, así como los programas de adquisición y procesamiento de espectros, /3/, /4/, que permite profundizar en el estudio de la radiación gamma y sus interacciones con la sustancia.

Análisis de la contribución a la formación del estudiante:

1. INSTRUMENTACIÓN ELECTRÓNICA

Si bien, uno de los objetivos del laboratorio docente es el de posibilitar las habilidades en el uso de instrumentos de medición, que en la generalidad de los casos, por su diseño y construcción, se convierten en *cajas negras* de las que se sirve el estudiante, sin reparar en su estructura y concepción electrónica, la interfaz descrita /2/, por el contrario, permite la caracterización de la altura de los pulsos, su ancho mínimo, los tiempos de subida y bajada así como la duración de estos, antes y después de ser procesados por el convertidor análogo-digital tipo Wilkinson incorporado.

Importantes magnitudes tales como el tiempo de conversión, la no-linealidad integral y la diferencial también pueden ser determinadas por el estudiante, en suma al estudio pormenorizado del comportamiento de los sistemas detectores, como se recomienda en /5/, /6/.

2. ESTADÍSTICA, FUNCIONES DE DISTRIBUCIÓN Y SUAVIZAMIENTO ESPECTRAL

Debido a la naturaleza estadística de la desintegración nuclear y de los procesos de detección, se hace necesario utilizar la función de distribución de Poisson para la descripción de los mismos, como caso límite de las distribuciones multinomial y binomial; si a esto añadimos el conocimiento previo de los usos y aplicaciones de la función de Gauss, puede comprenderse la utilidad de aplicación de un sistema espectrométrico que con rapidez y reproducibilidad facilite la validación de estas categorías puramente estadísticas.

Tan significativo como lo anterior resulta para el estudiante la asimilación de la esencia matemática y particularidades de uso del suavizamiento espectral como técnica de procesamiento que correctamente aplicada, elimina la mayoría de las fluctuaciones estadísticas, reteniendo los elementos más importantes de los datos originales /7/.

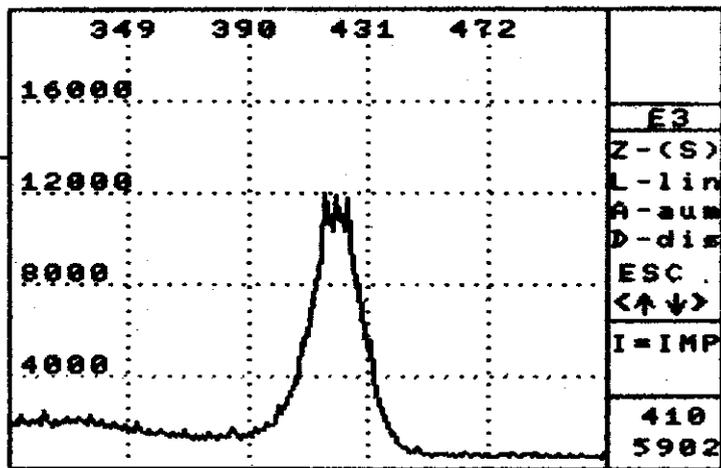
Con el propósito de ampliar estos tópicos se incorpora la discusión de los efectos del suavizamiento utilizando las expresiones:

$$Y_i = \left[\frac{Y_{i-1} + 2Y_i + Y_{i+1}}{4} \right] \dots\dots\dots (1)$$

$$Y_i = \left[\frac{Y_{i-2} + 4Y_{i-1} + 6Y_i + 4Y_{i+1} + Y_{i+2}}{16} \right] \dots\dots\dots (2)$$

para 3 ó 5 puntos respectivamente y en el caso de adoptarse el suavizamiento con cantidad variable de puntos hasta un máximo de 21, en lugar de utilizarse métodos complicados de filtrado por medio de integrales de convolución, /7/ se aproxima la zona de interés en el espectro por un polinomio ajustado por mínimos cuadrados. En las expresiones (1) y (2), Y_i , representa los conteos por unidad de tiempo en el canal i -ésimo.

Figura 1.
Espectro (conteos contra canal) de ^{137}Cs sin suavizar. Obsérvese la presencia de fluctuaciones estadísticas inherentes a los procesos desintegrativos y a los de detección propiamente dichos.



La Figura 1 muestra el espectro original (sin suavizar) del isótopo ^{137}Cs y las Figuras 2, 3, 4 y 5 permiten discutir el efecto del suavizamiento con 3, 5, 13 y 21 puntos respectivamente. Nótese que se ha hecho uso de la opción ZOOM /2/ para facilitar la discusión del problema.

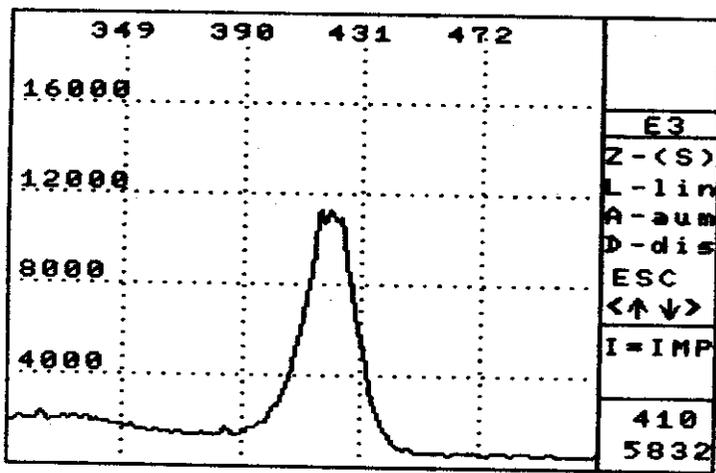


Figura 2.

Espectro (conteos contra canal) de ^{137}Cs suavizado con 3 puntos mediante la expresión (1).

Figura 3.

Espectro (conteos contra canal) de ^{137}Cs suavizado con 5 puntos mediante la expresión (2).

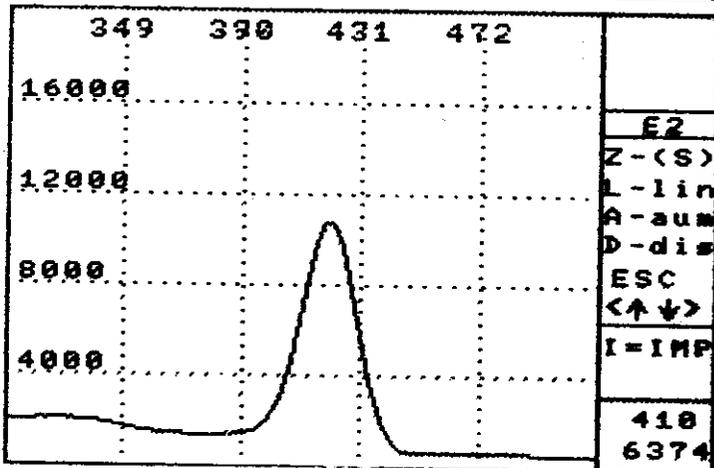
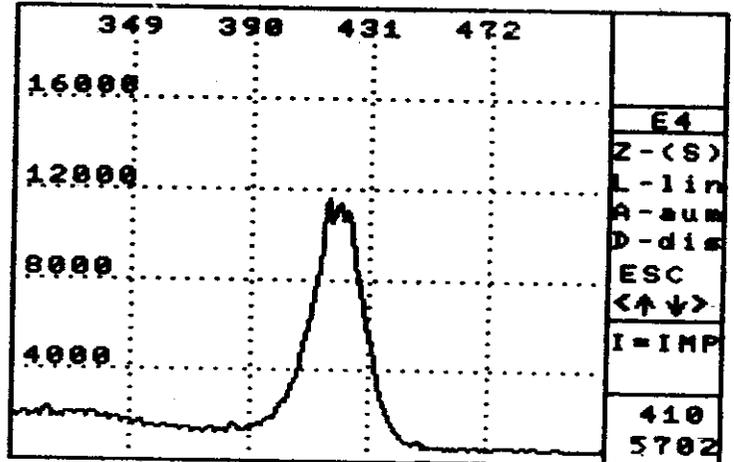
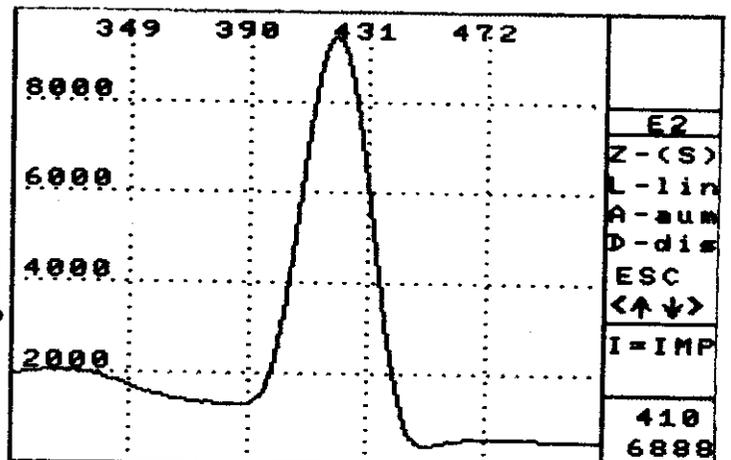


Figura 4.

Espectro (conteos contra canal) de ^{137}Cs suavizado con cantidad variable de puntos hasta un máximo de 13.

Figura 5.

Espectro (conteos contra canal) de ^{137}Cs suavizado con cantidad variable de puntos hasta un máximo de 21.



3. AJUSTES POLINÓMICOS Y CRITERIOS ESTADÍSTICOS

Debido a la necesidad de establecer la línea base al considerar el fondo superpuesto al pico de interés, como se muestra en la Figura 6, cuando se ejercitan los conceptos fundamentales de la espectrometría

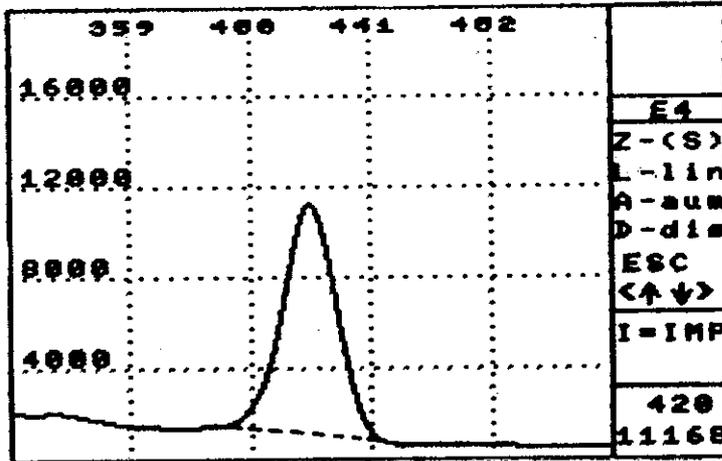


Figura 6. Ajuste de la línea base en el espectro (conteos contra canal) de ^{137}Cs mediante un polinomio de grado 1, con cantidad seleccionable de puntos.

gamma, el estudiante se familiariza con desarrollos polinómicos de orden superior y con el uso de pruebas de bondad para el ajuste; sin embargo, resulta muy útil la opción *RESTA*, /2/, para sustraer por la vía instrumental el fondo radiactivo (Figura 7) y comparar los resultados a través de magnitudes tales como la integral, el área neta, el fondo calculado y los errores implícitos en el procesamiento.

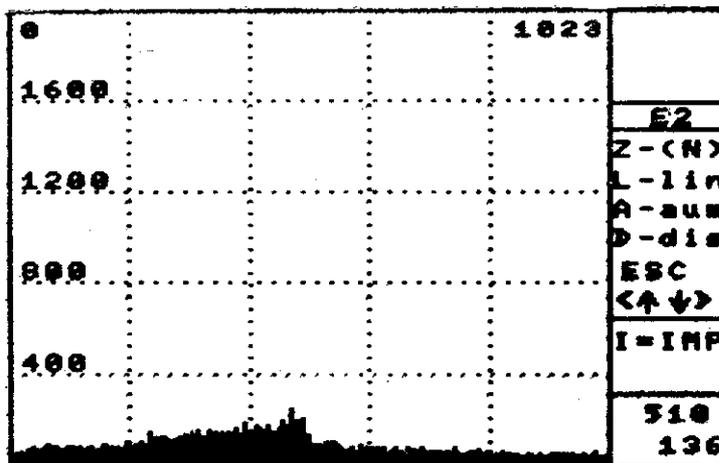


Figura 7. Espectro (conteos contra canal) correspondiente al fondo en el laboratorio, para ser sustraído mediante la opción "RESTA".

4. USO DE PROCEDIMIENTOS ESPECIALES

La determinación cuantitativa de las magnitudes características del espectro como son la integral de conteos, el área neta, el fondo, la posición del pico y sus extremos involucra diversos procedimientos entre los que se encuentran el cálculo de la transformada del espectro, /8/, la evaluación de áreas por el método de los trapecios, la linealización de gaussianas y ajuste por mínimos cuadrados así como la incorporación del promedio ponderado. Todos estos aspectos son desde el punto de vista práctico, necesarios en diferentes ramas de la física aplicada, pero no se encuentran recogidos en el sistema de conocimientos y habilidades que debe adquirir el estudiante durante los primeros años de la especialidad; de allí su importancia y utilidad.

Es conveniente recalcar que el montaje de prácticas docentes cuya fundamentación se derive de posibilidades concretas de utilización en la investigación o la industria, conlleva a una mayor apropiación de los conocimientos. Este es el caso de la espectrometría gamma, la que en conjunción con otras técnicas de análisis como la fluorescencia y difracción de Rayos X, la activación neutrónica, la retrodispersión de Rutherford, y otros, permite el estudio composicional de muestras de muy variado origen.

La concreción de los aspectos de orden metodológico y cognoscitivo discutidos en el presente trabajo pueden encontrarse en /9/.

CONCLUSIONES

El desarrollo de un espectrómetro multicanal con fines docentes posibilita la introducción en el laboratorio de numerosos e importantes conceptos de la espectrometría gamma, lo cual además, lleva aparejada la concreción de métodos de análisis de profunda vinculación con el aparato matemático que el estudiante adquiere durante los primeros cursos de la especialidad de Física. Sus ventajas, más que económicas están dadas por el incremento de las habilidades experimentales de los estudiantes, lo cual redundará en la mejora del proceso de enseñanza-aprendizaje.

Por su diseño y posibilidades favorece la enseñanza tanto en el nivel superior como el técnico y el medio, siempre que se adecuen los objetivos pertinentemente.

BIBLIOGRAFÍA

- /1/ Portuondo, R. (1988). *Procesamiento de Datos Experimentales*. Universidad de La Habana.
- /2/ Hernández, M.; E. Marín y R. Soto. *Diseño y Caracterización de una Interfase para la Adquisición de Espectros de Radiación Gamma*. (Por publicar).

- /3/ Marín, E.; R. Soto y M. Hernández. *Programa MSX-Basic para el procesamiento de Espectros de Radiación*. (Por publicar).
- /4/ Soto, R.; E. Marín; M. Hernández. *Programa MSX-Basic para el Procesamiento Analítico Automático de Espectros de Radiación Gamma*. (Por publicar).
- /5/ Canberra. (1988). *Laboratory Manual for Nuclear Science*.
- /6/ Diefenderfer, A. (1972). *Basic Techniques in Electronic Instrumentation*. Philadelphia.
- /7/ Quittner, P. (1972). *Gamma-Ray Spectroscopy*. Akadémiai Kiadó. Budapest.
- /8/ Fite, L.; E. Steele and R. Wainerdi (1962). *Investigations in Automated Activation Analysis*. TEES-2671 -2. Cat. No. UC-23.
- /9/ Marín, E.; P. González y R. Soto. *Manual de Prácticas de Laboratorio de Física Cuántica*. (En preparación).

Diseño y caracterización de una interfaz para la adquisición de espectros de radiación gamma

M. Hernández, E. Marín y R. Soto, Dpto. Física General, Facultad de Física, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se describe y caracteriza una interfaz para computadora TOSHIBA. Las características evaluadas demuestran su posibilidad de utilización como convertidor análogo-digital en un sistema espectrométrico de uso docente. Se presenta, además, un programa desarrollado en lenguaje MSX-Basic para el registro y operaciones fundamentales durante la adquisición de espectros de radiación gamma.

ABSTRACT

An interface for TOSHIBA personal computer is described. The evaluation of its characteristics shows the possibility of using it as analog-digital converter in spectrometer systems for educational purposes. It is also presented a MSX-Basic program which provides a very flexible data acquisition facility during gamma spectrum analysis applications.

INTRODUCCIÓN

Los analizadores multicanales constituyen el centro instrumental de la mayoría de las determinaciones experimentales en las que la adquisición y evaluación de espectros provee de importantes magnitudes que caracterizan la desintegración radiactiva de los elementos así como las peculiaridades de la interacción de la radiación con la sustancia.

/1/,/2/,/3/.

Las técnicas de medición de radiaciones nucleares se utilizan, en la actualidad, no sólo en las investigaciones sino como medio auxiliar en otros campos (Medicina, Biología, Química, Arqueología, Geología, etc.), /4/. En el presente trabajo se describe un sistema, que supone el montaje experimental integrado por el detector de radiaciones, una fuente de alto voltaje, la interfaz que actúa como convertidor análogo-digital, el software y la computadora, para la adquisición de espectros de radiación gamma con fines docentes y amplias posibilidades de uso en la práctica investigativa, (cambiando algunos parámetros característicos), en el estudio de otros tipos de radiación o de las técnicas asociadas, entre ellas, la espectroscopía infra-roja, Mössbauer, Rayos X, etc.

DESARROLLO

1. DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA

En la Figura 1 se muestra el diagrama de bloques del sistema. En el mismo se emplea una computadora TOSHIBA (PC) y un detector de centelleo que incluye el fotomultiplicador electrónico para la amplificación de la señal de salida así como la fuente de alto voltaje para su alimentación. La interfaz construida y el software elaborado completan el sistema que puede realizar las funciones de un analizador multicanal con múltiples facilidades de uso.

SISTEMA PARA ADQUISICION Y PROCESAMIENTO ANALITICO DE ESPECTROS DE RADIACIONES NUCLEARES

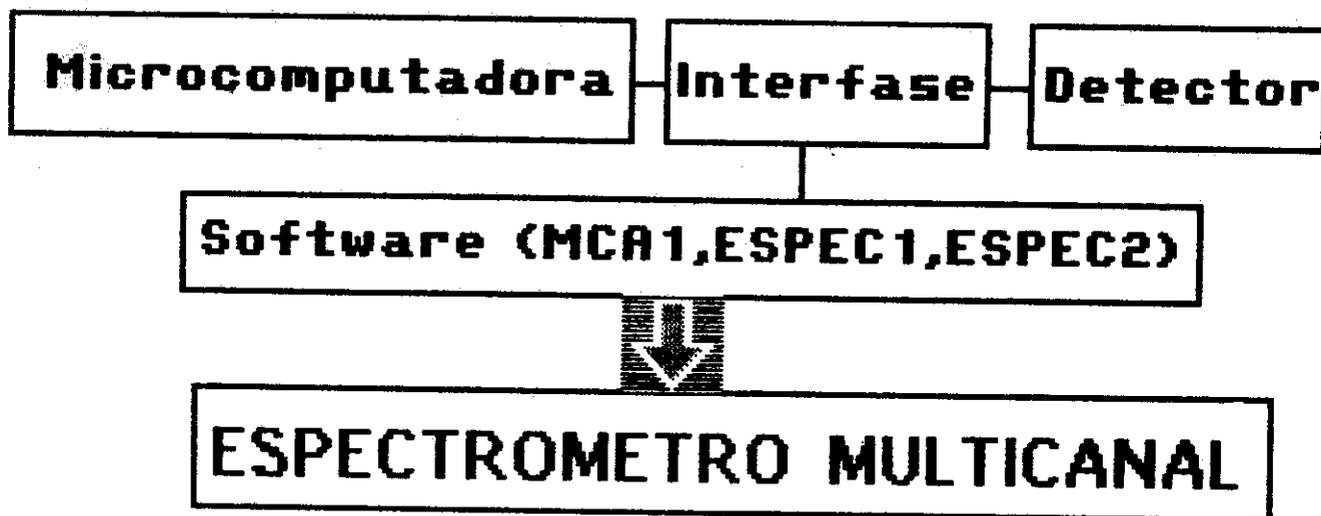


Figura 1. Diagrama de bloques del sistema para la adquisición, operaciones fundamentales y procesamiento analítico de espectros de radiación gamma.

En la Física Nuclear, los analizadores multicanales se usan mayormente en el modo de trabajo PHA (análisis de alturas de pulsos) y/o MCS (conteo múltiple),/4/. El sistema diseñado permite ambos modos en dos variantes cada uno y un tercero de conteo simple, lo que conlleva a disponer de cinco modos diferentes de adquisición de espectros, que pueden ser seleccionados a voluntad por el usuario.

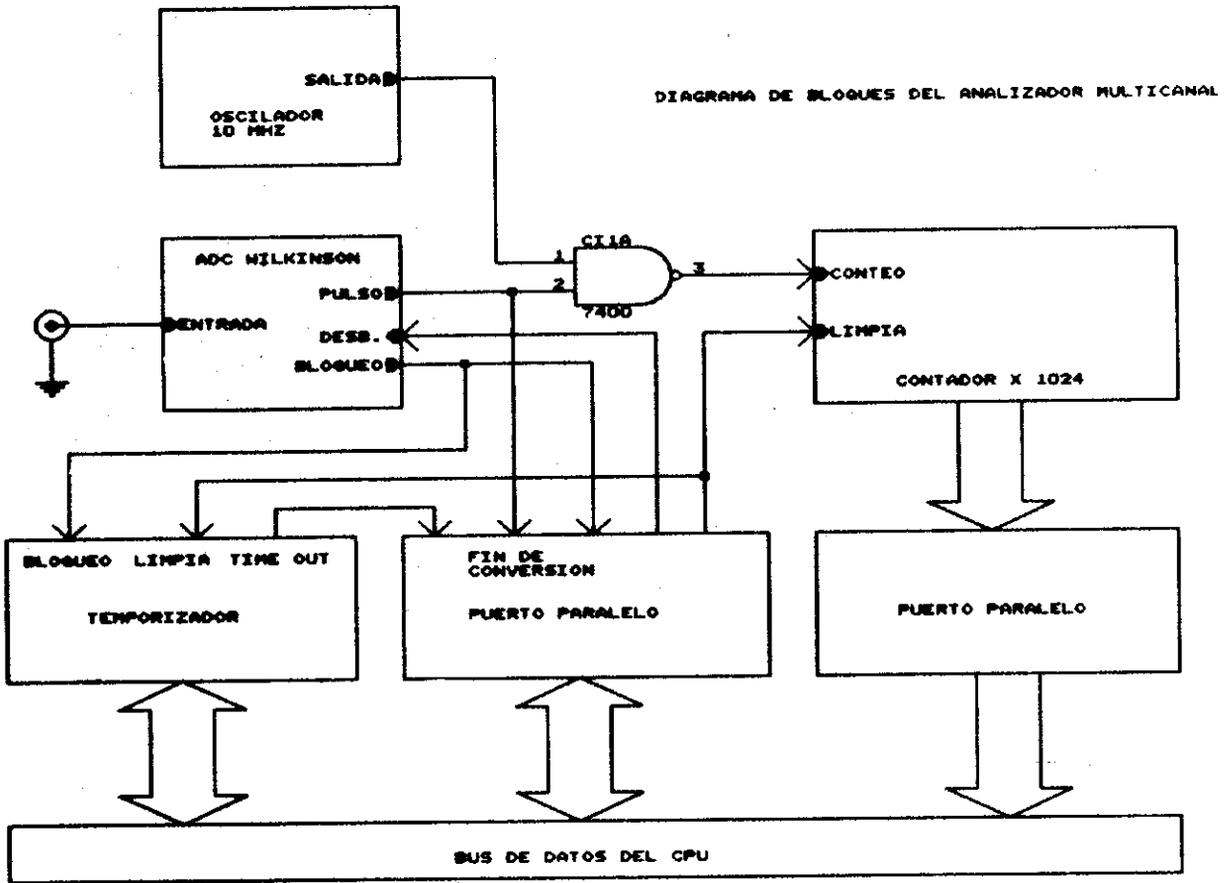


Figura 2. Diagrama de bloques de la interfaz de conversión analógico-digital.

En la Figura 2 se muestra el diagrama de bloques de la interfaz, cuya función fundamental la realiza el convertidor analógico-digital (ADC) y que consiste en digitalizar los pulsos que provienen del fotomultiplicador para su posterior procesamiento en la computadora. En la espectroscopia de alta resolución se usa el conversor tipo Wilkinson que se muestra en la Figura 3 y que se utiliza en la interfaz construida.

El método de conversión consiste en cargar un capacitor hasta el valor de pico del pulso de entrada y descargarlo a través de una fuente de corriente constante. El tiempo transcurrido para que el capacitor se descargue es proporcional a la altura de los pulsos de entrada.

2. CARACTERIZACIÓN:

Las características del conversor que hacen posible su aplicación en el sistema espectrométrico descrito, son las siguientes:

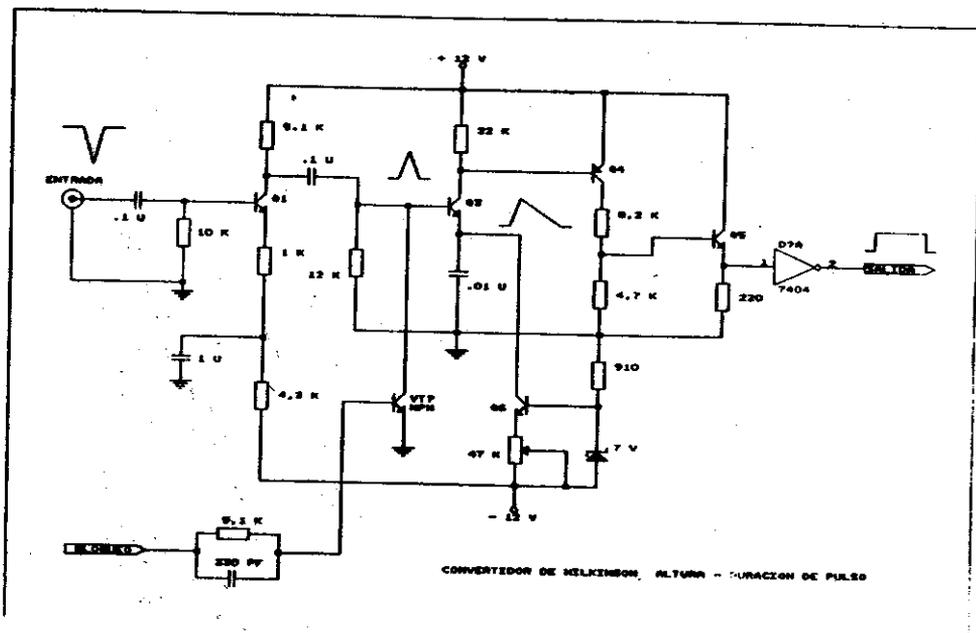


Figura 3. Esquema del convertidor tipo Wilkinson utilizado en el diseño de la interfaz.

Altura de los pulsos de entrada	0.....2 volts
Ancho mínimo del pulso	2 μ s
Tiempo de subida	1.2 μ s
Tiempo de bajada	0.3 μ s
Duración del pulso	2.....3 μ s
Impedancia de entrada	10K omhs
Tiempo de conversión	102.4 μ s

Otras especificaciones importantes del analizador multicanal son la no-linealidad integral y diferencial /4/.

La no-linealidad integral se define como la mayor desviación de la función de conversión (altura de pulsos VS canal), como se muestra en la Figura 4. Su valor es de 0.083 % mientras que los valores típicos reportados se encuentran entre 0.05 0.1 % /1/.

La no-linealidad diferencial describe la desviación máxima de la anchura del canal respecto del ancho promedio del mismo (el número de pulsos que llegan a un canal es proporcional a su anchura), como se muestra en la Figura 5. Su valor medido es de \pm 0.35 % para un 99 % de la escala.

El modo de trabajo PHA se caracteriza por una frecuencia del cristal de 10 MHz.

El modo MCS se caracteriza por un tiempo mínimo de búsqueda en cada canal de 1S, y la cantidad de ciclos a realizar en cada búsqueda puede ser seleccionada a voluntad por el usuario.

NO-LINEALIDAD INTEGRAL

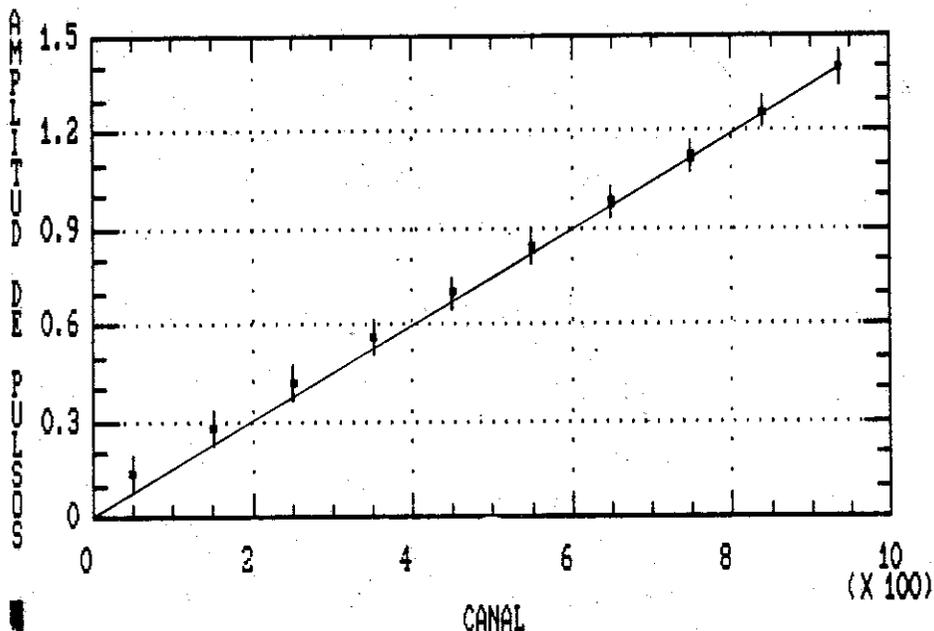


Figura 4. Comportamiento de la No-Linealidad Integral para la interfaz construida.

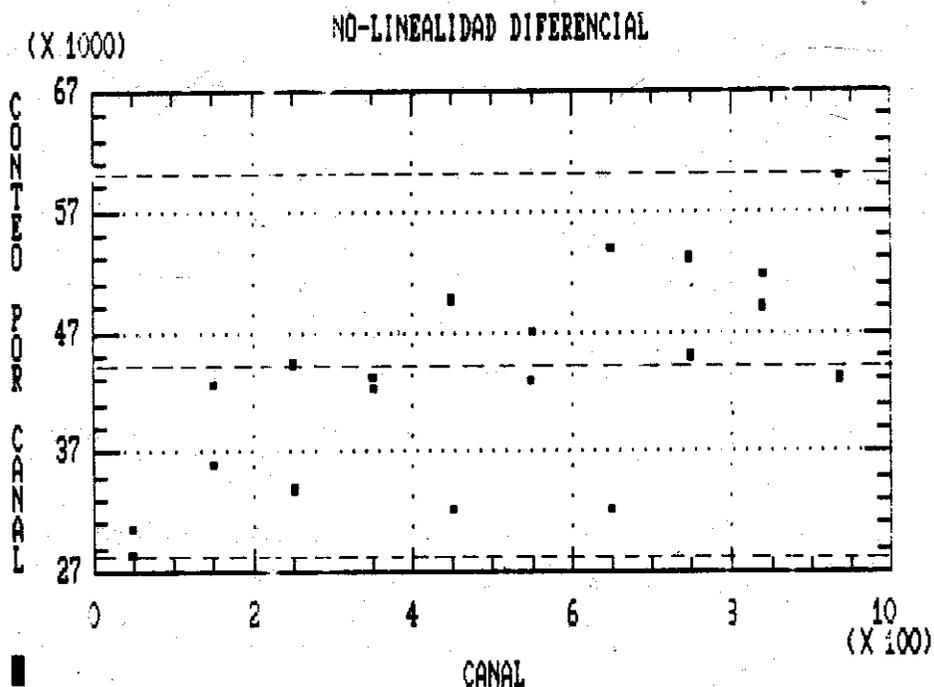


Figura 5. Comportamiento de la No-Linealidad Diferencial para la interfaz construida.

La interfaz construida presenta además, las siguientes características:

Bajo costo (menos de 100 dólares USA)

Estructura compacta y pequeñas dimensiones:

longitud: 20 cm

anchura: 14 cm

Altura: 11 cm

Indicador analógico de tiempo muerto.

Diseño abierto que permite el acceso directo a la electrónica.

3. SOFTWARE:

3.1. Facilidades de adquisición:

El programa permite la adquisición de espectros en modo PHA (análisis de alturas de pulsos), prefijando conteos entre 0 y 65535 para cualquier canal entre 0 y 1023 o tiempos de medición en el intervalo 1 a 65536 segundos, con la posibilidad, en este caso, de hacer la corrección por tiempo muerto del sistema.

El segundo modo incorporado es el de conteo múltiple para intervalo de canales prefijado por el usuario, MCS, con tiempo de búsqueda en cada canal entre 1 y 65536 segundos, así como la posibilidad automática de repetir el proceso de medición para una cantidad de ciclos también seleccionable. Como última opción de adquisición, el programa brinda la posibilidad de efectuar el conteo simple en el intervalo 1-65536 segundos, repetible o no a voluntad y con las facilidades de corrección por tiempo muerto del sistema, también incorporadas.

3.2. Operaciones con espectros:

El programa prevee el registro permanente de cuatro espectros en la memoria de la PC, por ello, se incorporan totalmente protegidas contra cualquier error de manipulación de los datos las siguientes operaciones:

- a) *Operaciones de entrada y salida de información* (almacenamiento y/o lectura) en cassette.
- b) *Transferencia de espectros desde el primer cuarto de la memoria a cualesquiera otras porciones.*
- c) *Suma y resta de espectros así como la multiplicación de estos por una constante positiva entre 0 y 255.* Se aclara que las operaciones mencionadas son posibles para cualesquiera cuatro espectros almacenados en la memoria, si han sido obtenidos mediante el mismo modo de adquisición, lo cual queda automáticamente registrado en el canal cero del espectro, desde el instante en que comienza la obtención del mismo.

d) *Representación gráfica del espectro.* Esta operación está prevista para salida por pantalla y cuenta con selección automática de escala, representación lineal o logarítmica, cambios manuales del factor de escala, información continua de la posición del cursor y de los conteos para la misma, facilidades de expansión de zonas escogidas del espectro (ZOOM), que quedan definidas a voluntad por la posición del cursor, modo de adquisición y zona de la memoria en la que se encuentra almacenado el espectro.

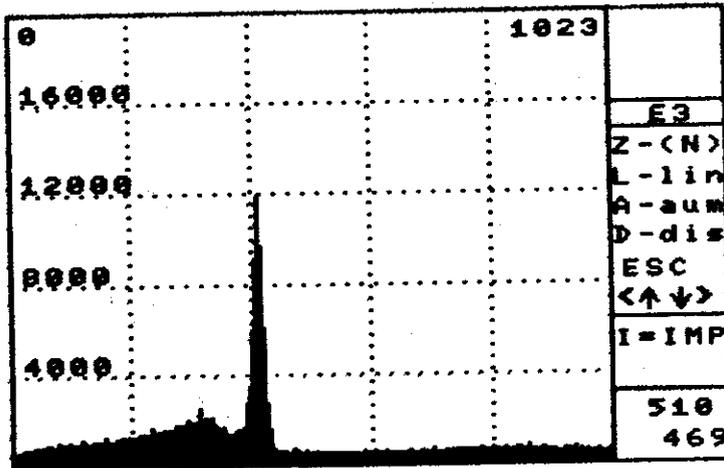


Figura 6. Espectro (conteo contra canal) de ^{137}Cs adquirido en el modo PHA.

La Figura 6 muestra un espectro de ^{137}Cs , adquirido en el modo PHA con un tiempo de conteo corregido de 1200 s. En el extremo inferior derecho se reportan la posición del cursor en canales y la cantidad de conteos para la misma. También se aprecian las diferentes opciones de trabajo destinadas a facilitar la visualización gráfica del espectro.

En la Figura 7 se observa el espectro anterior expandido en la zona alrededor del fotopico, la cual se escoge a voluntad mediante la opción ZOOM.



Figura 7. Espectro (conteo contra canal) de ^{137}Cs expandido en la zona alrededor del fotopico utilizando la opción (ZOOM).

e) *Comparar espectros*: Permite la salida por pantalla de dos cualesquiera espectros con la misma escala vertical, lo que facilita la labor de comparación, y además, con las mismas facilidades descritas en lo que respecta a la graficación ya discutida. Se aclara que el movimiento vertical del cursor sirve para explorar la cantidad de conteos por canal, en uno u otro espectro, según se sitúe.

En la Figura 8 aparecen comparados el espectro del ^{137}Cs mostrado en la Figura 6 y el de ^{22}Na , adquirido bajo las mismas condiciones. Nótese que para utilizar esta facilidad, el espectro correspondiente al ^{137}Cs fue previamente transferido a la tercera porción de la memoria (E3) para dejar libre la primera (E1) donde se efectúa la adquisición del otro espectro el cual también se transfirió hacia E4.

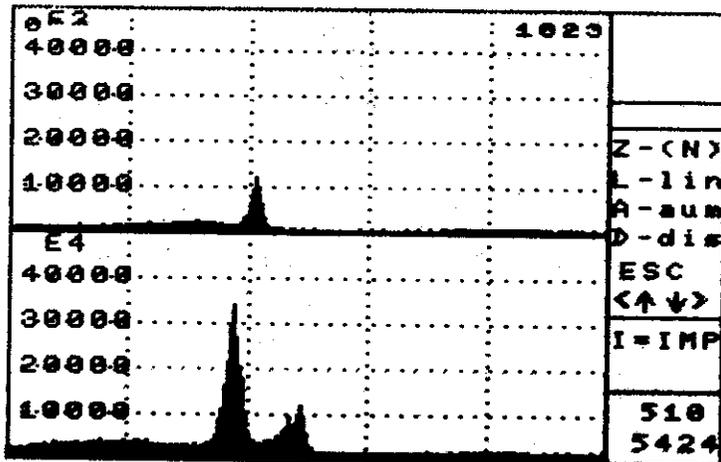


Figura 8. Comparación de los espectros (conteos contra canal) de ^{137}Cs y ^{22}Na adquiridos bajo las mismas condiciones experimentales.

f) *Estado del sistema*: Visualiza en pantalla la información sobre número del espectro, modo de adquisición, tiempo en segundos, e identificación física real del mismo si esta opción ya se ha utilizado dentro del programa.

g) *Identificación de espectros*: Permite la identificación de los espectros a partir de un listado actualizable de radioisótopos.

3.3. Concepción general del programa

La organización parte de un programa principal que contiene los menú correspondientes y las subrutinas PHA a tiempo fijo, PHA a conteo fijo, MCS, Limpia memoria, Transfiere, Suma, Resta, Multiplica, Conteo simple y Máximo, todas escritas en código de máquina con el consiguiente incremento de la velocidad de corrida, /5/.

Por otra parte, como el programa está orientado hacia las aplicaciones docentes, hace continua previsión de los posibles errores de manipulación del estudiante evitando así la necesidad de abortar el trabajo.

4. APLICACIONES

Las características mencionadas permiten un amplio espectro de utilización en la docencia, lo cual puede beneficiar a diferentes niveles educacionales como el medio-superior (en la orientación vocacional y pre-profesional), el superior (en asignaturas de pre y postgrado) y el técnico, (en la calificación de especialistas de los institutos de medicina nuclear).

También puede utilizarse en el estudio de la instrumentación electrónica por la posibilidad de acceso a diferentes secciones del circuito para la medición de parámetros característicos y del comportamiento dinámico de la interfaz.

CONCLUSIONES

Se describe una interfaz y un programa MSX-Basic compatible que permiten el uso de la PC TOSHIBA en un sistema de adquisición y operaciones básicas con espectros de radiación gamma, previas al procesamiento analítico de los mismos.

Las características del sistema y principalmente su bajo costo de producción junto al hecho de la existencia de este tipo de computadora en la mayoría de los centros educacionales del país, hacen posible la familiarización del estudiante de diferentes niveles, con técnicas experimentales de gran importancia y versatilidad, aspecto difícil de lograr con los escasos equipos comerciales existentes, los cuales son muy costosos y están destinados fundamentalmente a las tareas investigativas.

El uso del software descrito posibilita que no sea necesario realizar grandes inversiones para dotar los laboratorios docentes de facilidades similares a las que encuentra el investigador en su trabajo cotidiano; permite concretar el empleo de las PC en el proceso de enseñanza, al igual que en otros campos, lo cual se sustenta en la favorable tendencia prestaciones/precio de las mismas. Por otra parte, es notable la elevación de la calidad del aprendizaje en tanto se utilicen medios y procedimientos en concordancia con el desarrollo científico técnico presente.

Por su versatilidad y concepción interactiva, se hace útil no sólo en el laboratorio docente, sino también en usos demostrativos que propician la motivación vocacional y profesional de los estudiantes.

BIBLIOGRAFÍA

- /1/ Canberra. Catálogo sobre Instrumentación Nuclear. 7ma. Edición.
- /2/ Knoll, G. (1978). *Radiation Detection and Measurement*. John Wiley & Sons. N. Y.

- /3/ De Soete, D.; R. Gijbels and J. Hoste (1972). *Neutron activation Analysis*. Volume 34 on Chemical Analysis: A Series of Monographs on Analytical Chemistry and its Applications. John Wiley & Sons. N. Y.
- /4/ Friese, T. (1981). *Nuclear Electronics*. Hahn-Meitner-Institut f. Kernforschung. Berlin-Wannsee.
- /5/ Sato, T.; P. Mapstone e I. Muriel (1989). *MSX Guía del programador y manual de referencia*. Editora Revolucionaria.

Diseño y caracterización de una interfaz para la adquisición de espectros de radiación gamma

M. Hernández, E. Marín y R. Soto, Dpto. Física General, Facultad de Física, Universidad de La Habana

RESUMEN

Se describe y caracteriza una interfaz para computadora TOSHIBA. Las características evaluadas demuestran su posibilidad de utilización como convertidor análogo-digital en un sistema espectrométrico de uso docente. Se presenta, además, un programa desarrollado en lenguaje MSX-Basic para el registro y operaciones fundamentales durante la adquisición de espectros de radiación gamma.

ABSTRACT

An interface for TOSHIBA personal computer is described. The evaluation of its characteristics shows the possibility of using it as analog-digital converter in spectrometer systems for educational purposes. It is also presented a MSX-Basic program which provides a very flexible data acquisition facility during gamma spectrum analysis applications.

INTRODUCCIÓN

Los analizadores multicanales constituyen el centro instrumental de la mayoría de las determinaciones experimentales en las que la adquisición y evaluación de espectros provee de importantes magnitudes que caracterizan la desintegración radiactiva de los elementos así como las peculiaridades de la interacción de la radiación con la sustancia.

/1/,/2/,/3/.

Las técnicas de medición de radiaciones nucleares se utilizan, en la actualidad, no sólo en las investigaciones sino como medio auxiliar en otros campos (Medicina, Biología, Química, Arqueología, Geología, etc.), /4/. En el presente trabajo se describe un sistema, que supone el montaje experimental integrado por el detector de radiaciones, una fuente de alto voltaje, la interfaz que actúa como convertidor análogo-digital, el software y la computadora, para la adquisición de espectros de radiación gamma con fines docentes y amplias posibilidades de uso en la práctica investigativa, (cambiando algunos parámetros característicos), en el estudio de otros tipos de radiación o de las técnicas asociadas, entre ellas, la espectroscopía infra-roja, Mössbauer, Rayos X, etc.

DESARROLLO

1. DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA

En la Figura 1 se muestra el diagrama de bloques del sistema. En el mismo se emplea una computadora TOSHIBA (PC) y un detector de centelleo que incluye el fotomultiplicador electrónico para la amplificación de la señal de salida así como la fuente de alto voltaje para su alimentación. La interfaz construida y el software elaborado completan el sistema que puede realizar las funciones de un analizador multicanal con múltiples facilidades de uso.

SISTEMA PARA ADQUISICION Y PROCESAMIENTO ANALITICO DE ESPECTROS DE RADIACIONES NUCLEARES



Figura 1. Diagrama de bloques del sistema para la adquisición, operaciones fundamentales y procesamiento analítico de espectros de radiación gamma.

En la Física Nuclear, los analizadores multicanales se usan mayormente en el modo de trabajo PHA (análisis de alturas de pulsos) y/o MCS (conteo múltiple),/4/. El sistema diseñado permite ambos modos en dos variantes cada uno y un tercero de conteo simple, lo que conlleva a disponer de cinco modos diferentes de adquisición de espectros, que pueden ser seleccionados a voluntad por el usuario.

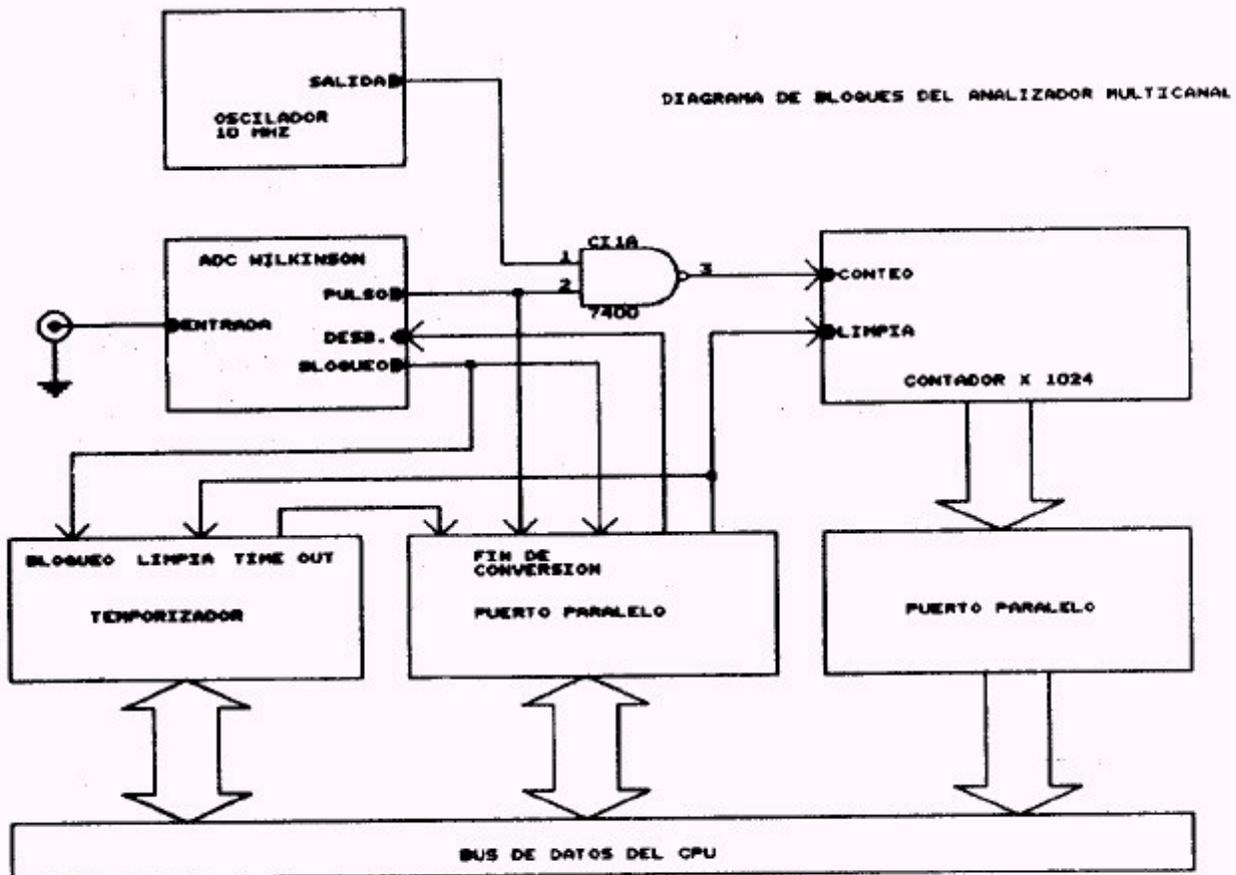


Figura 2. Diagrama de bloques de la interfaz de conversión analógico-digital.

En la Figura 2 se muestra el diagrama de bloques de la interfaz, cuya función fundamental la realiza el convertidor analógico-digital (ADC) y que consiste en digitalizar los pulsos que provienen del fotomultiplicador para su posterior procesamiento en la computadora. En la espectroscopia de alta resolución se usa el conversor tipo Wilkinson que se muestra en la Figura 3 y que se utiliza en la interfaz construida.

El método de conversión consiste en cargar un capacitor hasta el valor de pico del pulso de entrada y descargarlo a través de una fuente de corriente constante. El tiempo transcurrido para que el capacitor se descargue es proporcional a la altura de los pulsos de entrada.

2. CARACTERIZACIÓN:

Las características del conversor que hacen posible su aplicación en el sistema espectrométrico descrito, son las siguientes:

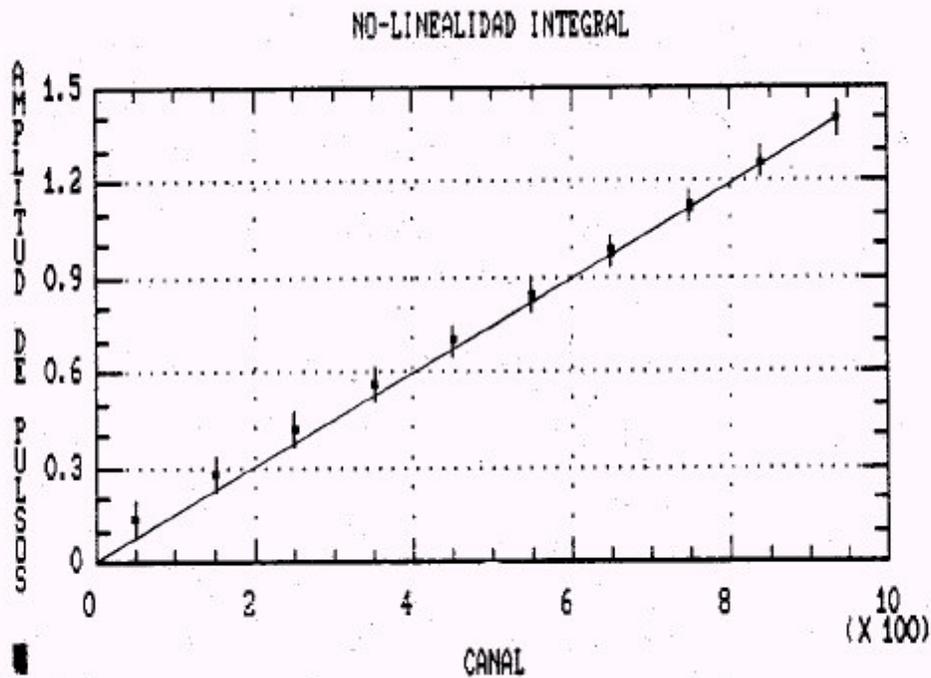


Figura 4. Comportamiento de la No-Linealidad Integral para la interfaz construida.

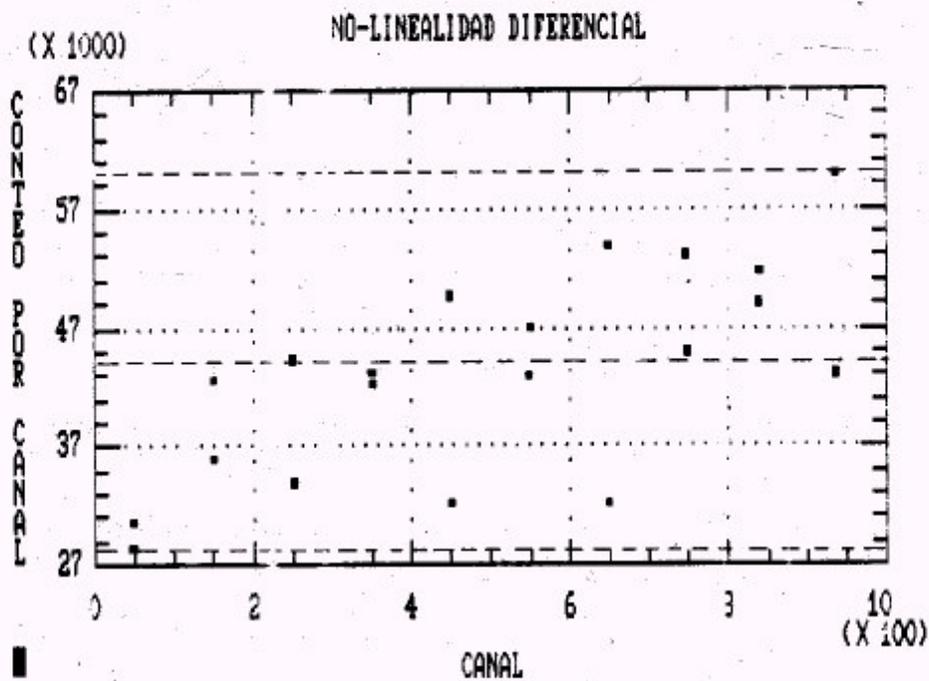


Figura 5. Comportamiento de la No-Linealidad Diferencial para la interfaz construida.

La interfaz construida presenta además, las siguientes características:

Bajo costo (menos de 100 dólares USA)

Estructura compacta y pequeñas dimensiones:

longitud: 20 cm

anchura: 14 cm

Altura: 11 cm

Indicador analógico de tiempo muerto.

Diseño abierto que permite el acceso directo a la electrónica.

3. SOFTWARE:

3.1. Facilidades de adquisición:

El programa permite la adquisición de espectros en modo PHA (análisis de alturas de pulsos), prefijando conteos entre 0 y 65535 para cualquier canal entre 0 y 1023 o tiempos de medición en el intervalo 1 a 65536 segundos, con la posibilidad, en este caso, de hacer la corrección por tiempo muerto del sistema.

El segundo modo incorporado es el de conteo múltiple para intervalo de canales prefijado por el usuario, MCS, con tiempo de búsqueda en cada canal entre 1 y 65536 segundos, así como la posibilidad automática de repetir el proceso de medición para una cantidad de ciclos también seleccionable. Como última opción de adquisición, el programa brinda la posibilidad de efectuar el conteo simple en el intervalo 1-65536 segundos, repetible o no a voluntad y con las facilidades de corrección por tiempo muerto del sistema, también incorporadas.

3.2. Operaciones con espectros:

El programa prevee el registro permanente de cuatro espectros en la memoria de la PC, por ello, se incorporan totalmente protegidas contra cualquier error de manipulación de los datos las siguientes operaciones:

- a) *Operaciones de entrada y salida de información* (almacenamiento y/o lectura) en cassette.
- b) *Transferencia* de espectros desde el primer cuarto de la memoria a cualesquiera otras porciones.
- c) *Suma y resta* de espectros así como la *multiplicación* de estos por una constante positiva entre 0 y 255. Se aclara que las operaciones mencionadas son posibles para cualesquiera cuatro espectros almacenados en la memoria, si han sido obtenidos mediante el mismo modo de adquisición, lo cual queda automáticamente registrado en el canal cero del espectro, desde el instante en que comienza la obtención del mismo.

d) *Representación gráfica del espectro.* Esta operación está prevista para salida por pantalla y cuenta con selección automática de escala, representación lineal o logarítmica, cambios manuales del factor de escala, información continua de la posición del cursor y de los conteos para la misma, facilidades de expansión de zonas escogidas del espectro (ZOOM), que quedan definidas a voluntad por la posición del cursor, modo de adquisición y zona de la memoria en la que se encuentra almacenado el espectro.

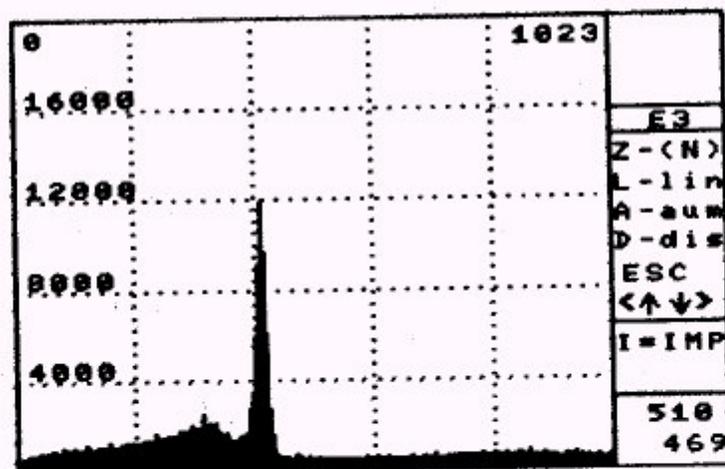


Figura 6. Espectro (conteo contra canal) de ^{137}Cs adquirido en el modo PHA.

La Figura 6 muestra un espectro de ^{137}Cs , adquirido en el modo PHA con un tiempo de conteo corregido de 1200 s. En el extremo inferior derecho se reportan la posición del cursor en canales y la cantidad de conteos para la misma. También se aprecian las diferentes opciones de trabajo destinadas a facilitar la visualización gráfica del espectro.

En la Figura 7 se observa el espectro anterior expandido en la zona alrededor del fotopico, la cual se escoge a voluntad mediante la opción ZOOM.

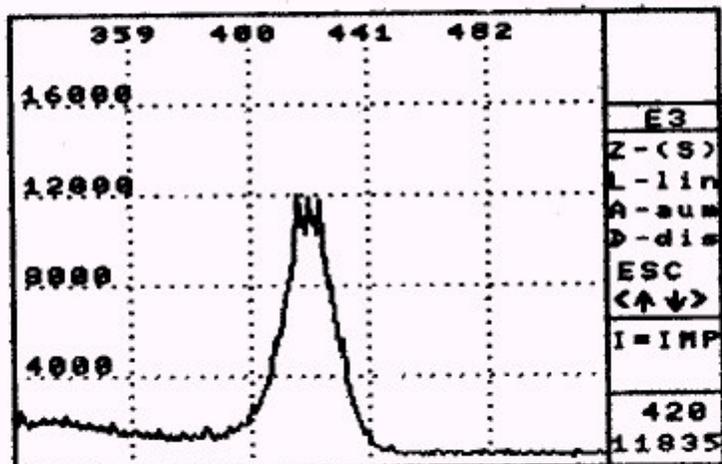


Figura 7. Espectro (conteo contra canal) de ^{137}Cs expandido en la zona alrededor del fotopico utilizando la opción (ZOOM).

- e) *Comparar espectros*: Permite la salida por pantalla de dos cualesquiera espectros con la misma escala vertical, lo que facilita la labor de comparación, y además, con las mismas facilidades descritas en lo que respecta a la graficación ya discutida. Se aclara que el movimiento vertical del cursor sirve para explorar la cantidad de conteos por canal, en uno u otro espectro, según se sitúe.

En la Figura 8 aparecen comparados el espectro del ^{137}Cs mostrado en la Figura 6 y el de ^{22}Na , adquirido bajo las mismas condiciones. Nótese que para utilizar esta facilidad, el espectro correspondiente al ^{137}Cs fue previamente transferido a la tercera porción de la memoria (E3) para dejar libre la primera (E1) donde se efectúa la adquisición del otro espectro el cual también se transfirió hacia E4.

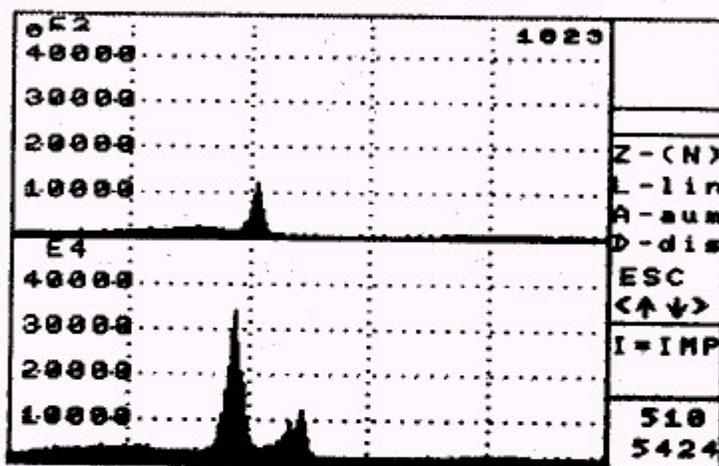


Figura 8. Comparación de los espectros (conteos contra canal) de ^{137}Cs y ^{22}Na adquiridos bajo las mismas condiciones experimentales.

- f) *Estado del sistema*: Visualiza en pantalla la información sobre número del espectro, modo de adquisición, tiempo en segundos, e identificación física real del mismo si esta opción ya se ha utilizado dentro del programa.
- g) *Identificación de espectros*: Permite la identificación de los espectros a partir de un listado actualizable de radioisótopos.

3.3. Concepción general del programa

La organización parte de un programa principal que contiene los menús correspondientes y las subrutinas PHA a tiempo fijo, PHA a conteo fijo, MCS, Limpia memoria, Transfiere, Suma, Resta, Multiplica, Conteo simple y Máximo, todas escritas en código de máquina con el consiguiente incremento de la velocidad de corrida, /5/.

Por otra parte, como el programa está orientado hacia las aplicaciones docentes, hace continua provisión de los posibles errores de manipulación del estudiante evitando así la necesidad de abortar el trabajo.

4. APLICACIONES

Las características mencionadas permiten un amplio espectro de utilización en la docencia, lo cual puede beneficiar a diferentes niveles educacionales como el medio-superior (en la orientación vocacional y pre-profesional), el superior (en asignaturas de pre y postgrado) y el técnico, (en la calificación de especialistas de los institutos de medicina nuclear).

También puede utilizarse en el estudio de la instrumentación electrónica por la posibilidad de acceso a diferentes secciones del circuito para la medición de parámetros característicos y del comportamiento dinámico de la interfaz.

CONCLUSIONES

Se describe una interfaz y un programa MSX-Basic compatible que permiten el uso de la PC TOSHIBA en un sistema de adquisición y operaciones básicas con espectros de radiación gamma, previas al procesamiento analítico de los mismos.

Las características del sistema y principalmente su bajo costo de producción junto al hecho de la existencia de este tipo de computadora en la mayoría de los centros educacionales del país, hacen posible la familiarización del estudiante de diferentes niveles, con técnicas experimentales de gran importancia y versatilidad, aspecto difícil de lograr con los escasos equipos comerciales existentes, los cuales son muy costosos y están destinados fundamentalmente a las tareas investigativas.

El uso del software descrito posibilita que no sea necesario realizar grandes inversiones para dotar los laboratorios docentes de facilidades similares a las que encuentra el investigador en su trabajo cotidiano; permite concretar el empleo de las PC en el proceso de enseñanza, al igual que en otros campos, lo cual se sustenta en la favorable tendencia prestaciones/precio de las mismas. Por otra parte, es notable la elevación de la calidad del aprendizaje en tanto se utilicen medios y procedimientos en concordancia con el desarrollo científico técnico presente.

Por su versatilidad y concepción interactiva, se hace útil no sólo en el laboratorio docente, sino también en usos demostrativos que propician la motivación vocacional y profesional de los estudiantes.

BIBLIOGRAFÍA

- /1/ Canberra. Catálogo sobre Instrumentación Nuclear. 7ma. Edición.
- /2/ Knoll, G. (1978). *Radiation Detection and Measurement*. John Wiley & Sons. N. Y.

- /3/ De Soete, D.; R. Gijbels and J. Hoste (1972). *Neutron activation Analysis*. Volume 34 on Chemical Analysis: A Series of Monographs on Analytical Chemistry and its Applications. John Wiley & Sons. N. Y.
- /4/ Friese, T. (1981). *Nuclear Electronics*. Hahn-Meitner-Institut f. Kernforschung. Berlin-Wannsee.
- /5/ Sato, T.; P. Mapstone e I. Muriel (1989). *MSX Guía del programador y manual de referencia*. Editora Revolucionaria.

Programa para acoplamiento y procesamiento de datos en difractómetros de la serie HZG-4

Alberto Serra Jones, Enrique Vega Reyes, Juan C. Molina, Laboratorio de Análisis Estructural IMRE

Alberto Serra Roure, IPVCE Mártires de Humbolt 7

RESUMEN

Se expone un programa, DIFA, en lenguaje QUICK-BASIC para microcomputadoras IBM compatibles que realiza la comunicación y procesamiento de datos para los difractómetros HZG-4 de la Freiburger Präzisionsmechanik.

ABSTRACT

An IBM compatible program, DIFA, in QUICK-BASIC language is presented. This program makes the communication and data-processing for any diffractometer of the series HZG-4 from Freiburger Präzisionsmechanik.

INTRODUCCIÓN

Debido a que los programas utilitarios que vienen acoplados a ciertos equipos comerciales no permiten su posterior desarrollo o adecuación a las necesidades particulares de cada laboratorio pues vienen en código de máquina, es que en este artículo se presenta la sustitución del programa SAP-30, acoplado al difractómetro HZG-4/A de la Freiburger Präzisionsmechanik y ejecutado por una minicomputadora KS 4100, por el

programa DIFA elaborado en lenguaje QUICK-BASIC para microcomputadoras IBM compatibles que realiza los mismos cálculos que el programa SAP-30, que puede ser adaptado a cualquier difractor de la línea HZG-4 y con la ventaja adicional de tener salida por disco lo que permite un posterior procesamiento de los resultados o datos por otros programas.

DESARROLLO

A. DESCRIPCIÓN DEL PROGRAMA

El programa DIFA consta de un programa principal que sólo contiene un menú central que envía a las diferentes subrutinas. Estas son:

1. *Subrutina COMUNIC.* Esta establece la comunicación con el difractor y es la encargada de recibir los parámetros de medición: ángulos final e inicial, paso angular, tiempo de medición y las opciones de la corrección de Rachinger y longitudes de onda. Esta subrutina además crea un fichero con los conteos de cada medición.
2. *Subrutina PROCES.* En esta subrutina se leen los conteos del fichero creado por la subrutina COMUNIC, se ordenan los datos de cada medición separando los picos de los fondos. Los fondos se procesan por el método de los mínimos cuadrados y finalmente se realiza la corrección de los mismos en cada pico.
3. *Subrutina SUAVIZA.* Aquí tiene lugar el suavizamiento de los picos. Este se realiza mediante la expresión /1/:

$$I(n) = (I\langle n-3 \rangle - 18I\langle n-2 \rangle + 63I\langle n-1 \rangle + 164I\langle n \rangle + 63I\langle n+1 \rangle - 18I\langle n+2 \rangle + I\langle n+3 \rangle) / 256 \quad (1)$$

y para los extremos:

$$I\langle 0 \rangle = I\langle 1 \rangle; \quad I\langle -1 \rangle = I\langle 2 \rangle; \quad I\langle -2 \rangle = I\langle 3 \rangle$$

$$I\langle n+1 \rangle = I\langle n \rangle; \quad I\langle n+2 \rangle = I\langle n-1 \rangle; \quad I\langle n+3 \rangle = I\langle n-2 \rangle$$

El suavizado tiene lugar después de la corrección del fondo y en la opción de Rachinger.

4. *Subrutina AREA.* En esta subrutina se calcula la intensidad integral de los picos, así como la varianza y el centroide de acuerdo con las expresiones siguientes /2/:

$$\text{Intensidad Integral } I_{int} = \int I\langle 2\theta \rangle d\langle 2\theta \rangle \quad (2).$$

$$\text{Varianza} = (\int \langle 2\theta - \text{Centroide} \rangle^2 I\langle 2\theta \rangle d\langle 2\theta \rangle) / I_{int} \quad (3).$$

$$\text{Centroide} = (\int 2\theta I\langle 2\theta \rangle d\langle 2\theta \rangle) / I_{int} \quad (4).$$

5. *Subrutina MAX.* Una vez realizado el suavizamiento de los picos la subrutina MAX halla el máximo del pico por ajuste a una parábola de los tres puntos en el entorno del máximo. Esta subrutina calcula la posición del máximo y el ancho integral ambos en 2θ .

6. *Subrutina RACHING*. En esta subrutina se realiza la corrección de Rachinger mediante la expresión /1//2/:

$$I_{a_1} \langle 2\theta \rangle = I \langle 2\theta \rangle - \frac{1}{2} I \langle 2\theta - \Delta 2\theta \rangle \quad (5)$$

donde $\Delta 2\theta = 2 \tan \theta (\Delta \lambda / \lambda)$

y el valor $I \langle 2\theta - \Delta 2\theta \rangle$ se obtiene por interpolación lineal.

Una vez concluido este cálculo, la propia subrutina calcula el valor de la distancia interplanar correspondiente al pico ya corregido.

7. *Subrutina ALINEA*. Esta subrutina realiza la medición en la opción semiautomática del difractómetro de un pico previamente seleccionado.

En su salida esta subrutina da el listado de los conteos obtenidos y un gráfico donde se resalta el valor máximo de dicha medición.

Esta subrutina es especialmente útil en el proceso de alineación del difractómetro donde es importante la simetría del pico 0°

B. *Entrada y Salida del programa*

Los datos de entrada son los ya descritos en la subrutina COMUNIC, sin embargo, para hacer el programa lo más versátil posible, todos los parámetros de entrada se guardan en un fichero con el objetivo de utilizarlos posteriormente, pues es posible la corrida de un espectro varias veces con los mismos parámetros de entrada o se puede preparar un conjunto de mediciones para ser procesados en otra ocasión. Este fichero es susceptible de ser corregido dentro del mismo programa.

PEAK No 4 BACKGROUND CORRECTED

INT.: 76.35 I_{max}.: 568.81 2THE.max.: 54.380

CENTROID : 54.430 INT. BR.: 0.134 VAR.: 0.01056321

PEAK No 4 RACHINGER CORRECTED

INT.: 53.35 I_{max}.: 564.61 2THE.max.: 54.380

CENTROID : 54.396 INT. BR.: 0.094 VAR.: 0.01190226

THETA : 27.190 d : 1.6857 Ang.

Figura 1.

Muestra del fichero de resultados de un pico con corrección de Rachinger.

La Figura 1 muestra los resultados del procesamiento de un pico al que se le ha realizado la corrección por Rachinger. Es posible también obtener el listado de las intensidades en cada caso. La figura 2 muestra la salida gráfica del programa donde aparecen: el pico con la corrección del fondo y después de realizada la corrección por Rachinger, así como un resumen de los parámetros más importantes del pico.

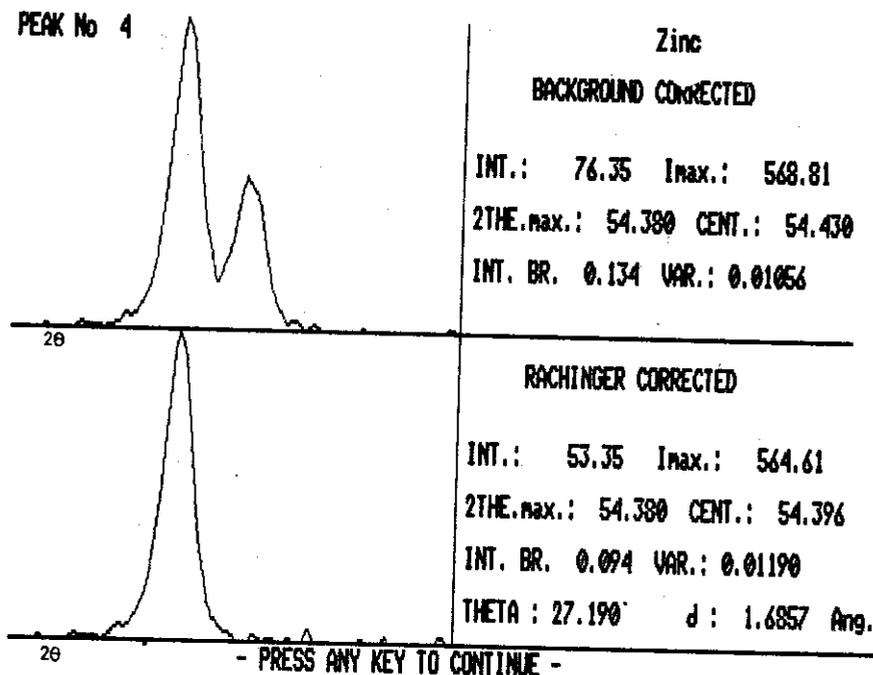


Figura 2. Salida gráfica del programa.

DISCUSIÓN

El programa DIFA, una vez compilado y enlazado (link), fue ejecutado en una IBM compatible provista de TURBO (16MHz) realizando el procesamiento de cinco picos con sus fondos, lo que hace un total de 753 mediciones, en un minuto lo que representa una velocidad varias veces mayor que con el equipamiento original del difractómetro.

Se compararon los resultados obtenidos con los que se obtienen en el equipo original y no se encontró diferencia alguna. Se confrontó alguna dificultad con el valor de los máximos pero este problema fue resuelto al llevar todos los cálculos a doble precisión.

El programa fue instalado en un equipo HZG-4/B que es la versión semiautomática sin computadora de la Freiburger Präzisionsmechanik y rindió los mismos resultados.

CONCLUSIONES

Se elaboró un programa de comunicación y procesamiento de datos para el difractómetro HZG-4/A cuya versatilidad, confiabilidad y rapidez representan un ahorro considerable de tiempo en las mediciones punto a punto.

La propia estructura del programa permite que este pueda ser ampliado y mejorado en el futuro.

AGRADECIMIENTOS

Los autores quieren agradecer la participación del laboratorio DIEES del IMRE, especialmente a los Lic. José Picans y José C. Alvarez por el diseño de la interface que hizo posible la comunicación de la computadora con el difractor. Asimismo quieren agradecer la participación del C.Dr. Francisco Cruz por la esclarecedora y crítica discusión del manuscrito.

BIBLIOGRAFÍA

1. Manual del programa SAP-30
2. Klug y Alexander (1973). *X-Ray Diffraction Procedures*. John Wiley and Sons, Second edition.

Aplicación de un método de linealización para la calibración de las fotoemulsiones en espectrografía de emisión

Fernando Berty Pérez, Juan Jiménez Chacón, Wiliam Rakip González,
Instituto de Materiales y Reactivos para la Electrónica, Universidad
de La Habana

RESUMEN

Se presenta la aplicación de un método computarizado para la total linealización de la función de calibración de la emulsión fotográfica escrito en BASIC N88. El programa rechaza observaciones anómalas y comprueba la normalidad de la distribución muestral, e imprime los estadígrafos de las magnitudes aleatorias consideradas. Se encontró por vez primera que la magnitud de la constante de transformación del método depende de la calidad y del vencimiento del material fotográfico así como de fallas durante el proceso de revelado y fijado.

ABSTRACT

The authors present a computarized method for the total linearization of the photographic calibration emulsion fuction wrote in BASIC N88 language. It was found for the first time, that the value of the transformation constant of the used method in this report depends on the quality and the life time of the photographic material, as well as the failure of the developing photographic process. The computation program rejects spurious observation, test the distribution's normality of the random magnitude considered and printed sample's statistical parameters.

1. INTRODUCCIÓN

En los trabajos cuantitativos en Espectroscopía Óptica de Emisión Atómica con registro fotográfico es esencial para mejorar la exactitud, y para la correcta calibración del sistema completo de medición, obtener la curva de calibración de las fotoplacas con la mejor precisión posible. Para alcanzar este objetivo, es mejor procesar la data experimental de forma computarizada.

El fundamento de los procedimientos de transformación de las lecturas microfotométricas de transmitancia (T_p) consiste en encontrar una relación lineal entre el parámetro fotográfico (P) y la exposición (H):

$$\log H = M \cdot P + \log C \quad (1)$$

donde M y C son parámetros dependientes del tipo de emulsión, proceso de revelado y de los parámetros del instrumento en la medición de los ennegrecimientos.

Con ese interés se fotografía un espectro de hierro en el intervalo de longitudes de ondas que se trabaja, con un sistema de iluminación homogéneo de la rendija del espectrógrafo a través de un atenuador de tres pasos de transmitancia. Esta manera de proceder se aconseja ya que no se necesitan conocer las intensidades relativas de las líneas de hierro para la calibración, y es ventajosa también porque la calibración no es sensible a fondos significativos del espectro^{1.2/}.

Para evaluar la magnitud de P se calcula una constante de transformación fotográfica. Se proponen en la literatura distintas formas de modificación de la magnitud T_p , con el objetivo de cambiar su relación compleja con la intensidad relativa de la línea espectral. En este sentido son muy conocidas las transformaciones^{2.3/} propuestas por: Arrak, Kaiser, Sampson, Baker-Sampson-Seidel, y Torok entre otras. Pero en general, el establecimiento de una transformación es un problema fundamentalmente práctico, pues se ha comprobado que las mismas dependen de los equipos que se utilizan entre otros factores.

Existen alternativas para la calibración de la emulsión que no se fundamentan en linealizar la función. Unos autores /4.5/ prefieren el ajuste total con funciones polinomiales para la curva preliminar y la de calibración de la emulsión. Otros^{6/} utilizan tres ecuaciones representativas de las porciones en que se dividen las curvas de calibración. Pero aún se buscan soluciones para linealizar la función de calibración^{7/}.

2. FUNDAMENTOS DEL MÉTODO DE BLEVINS Y O'NEILL

La investigación de Blevins y O'Neill^{8/} ha resuelto un problema importante para los espectroscopistas: la total linealización de la respuesta de la emulsión fotográfica. El interés principal de encontrar

una expresión que consiguiera representar la curva preliminar del método de Churchill como una línea recta^{/9/} determinó el uso de una ecuación de transformación cualitativamente diferente a las conocidas. El éxito de esta nueva transformación^{/8/} de las transmitancias se basa en que su expresión analítica opera sobre los valores leídos con un efecto de corrección proporcional al aumento del ennegrecimiento de las líneas espectrales. Su representación es:

$$P = \log \left[\left(\frac{1000 - T_P}{T_P} \right) * \left(\frac{A + T_P}{T_P} \right) \right] \quad (2)$$

donde: T_P es la transmitancia experimental; A es la constante de transformación.

Siempre es posible encontrar un valor de la constante A que ajuste una curva preliminar rectilínea con pendiente unitaria, esto es:

$$D = \text{Log} \cdot C_1 + L \quad (3)$$

donde: D y L son los valores de ennegrecimientos transformados por la ecuación (2) de las transmitancias de 100 y 50 % leídas en el atenuador de tres pasos. Y C_1 es una constante.

La curva de calibración queda descrita por la expresión:

$$\text{Log } I_r = M * \text{Log} \left[\left(\frac{1000 - T_P}{T_P} \right) * \left(\frac{A + T_P}{T_P} \right) \right] + \text{Log } C_2 \quad (4)$$

donde: I_r es la intensidad relativa de la línea.

La pendiente M se determina con el conocido factor de filtro del atenuador y la magnitud del intercepto $\text{Log } C_1$:

$$M = \text{Log} (\text{Factor de filtro}) / \text{Log } C_1 \quad (5)$$

Para determinar el intercepto ($\text{Log } C_2$) se asigna a la transmitancia de 900 una intensidad relativa unitaria. De la ecuación (4) se obtiene finalmente:

$$\text{Log } C_2 = - \left\{ M * \text{Log} \left[\left(\frac{1000}{900} \right) * \left(\frac{A + 900}{900} \right) \right] \right\} \quad (6)$$

3. PARTE EXPERIMENTAL

3.1 Equipos y materiales utilizados

El espectro del hierro para la calibración se obtiene en un espectrógrafo de red plana PGS-2 (Carl Zeiss-Jena), como fuente de excitación se usa un arco de corriente continua filtrada. La ranura del espectrógrafo se mantiene fija en 0.020 mm con un atenuador de tres pasos de transmitancia intercalado en el sistema de iluminación de tres lentes. Los espectros se registran en fotoplacas WU-3 de la ORWO.

Para el revelado y fijado de las fotoplacas se utilizan las fórmulas de la KODAK D-19 y F-5 y temperatura y tiempo de procesamiento de las

emulsiones constantes. La medición microfotométrica se realiza en el equipo MD-100 de la Carl Zeiss-Jena.

La acción de las transformaciones sobre la linealización de la función de calibración se realiza con la data obtenida de las mediciones de los ennegrecimientos en los pasos de transmitancia de 100 y 50 %.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 Programa para el tratamiento automatizado de la calibración de la fotoemulsión.

El programa escrito en BASIC N88 permite utilizar ficheros creados con anterioridad y realizar cualquier arreglo que se desee. Si se conocen los parámetros de calibración de la fotoemulsión (constantes A, Log C_2 , y M) no es necesario utilizar la subrutina de calibración de la emulsión sino que de inmediato se procede a la transformación de los ennegrecimientos a intensidades relativas.

En la Figura 1 se muestra un diagrama general del programa que puede ser solicitado a sus autores. Como parte distintiva de otros trabajos publicados^{/1-8/} se encuentra incluido en el sistema el rechazo de resultados que pueden perjudicar la calibración. Este utiliza la idea del método de la curva preliminar de Calker-Kasselmann^{/4/}; para ello, se divide la escala creciente en magnitud de pasos de ennegrecimientos del 50 % en ocho grupos, cada uno con un número de mediciones de pasos de T_p (de 100 % y 50 %) entre ocho y diez. Posterior a la introducción de los pares de lecturas del atenuador de tres pasos, el ordenador le entrega los resultados por pantalla e impresora computando los rechazos y otras magnitudes de interés.

La iteración para el cálculo de la constante de transformación se inicia a partir de cero y la magnitud del incremento de A es dependiente del vencimiento del material fotográfico. El proceso se detiene cuando la pendiente logra ser unitaria; se imprimen los parámetros de calibración de la fotoplaca para su posterior utilización. Opcionalmente pueden transformarse ennegrecimientos a intensidades a través de un formato de entrada/salida flexible.

Resultados semejantes a los reportados en la literatura^{/8/} se obtienen para las transformaciones mencionadas en la introducción.

El presente reporte confirma los resultados de la ecuación empírica seleccionada. La curva que se obtiene es una línea recta en toda la extensión de la zona graficada, tanto para la de bajas como de altas exposiciones. La universalidad de este resultado es un aspecto de interés a destacar pues, el problema de la capacidad de linealizar de las transformadas está relacionada también al equipamiento, condiciones

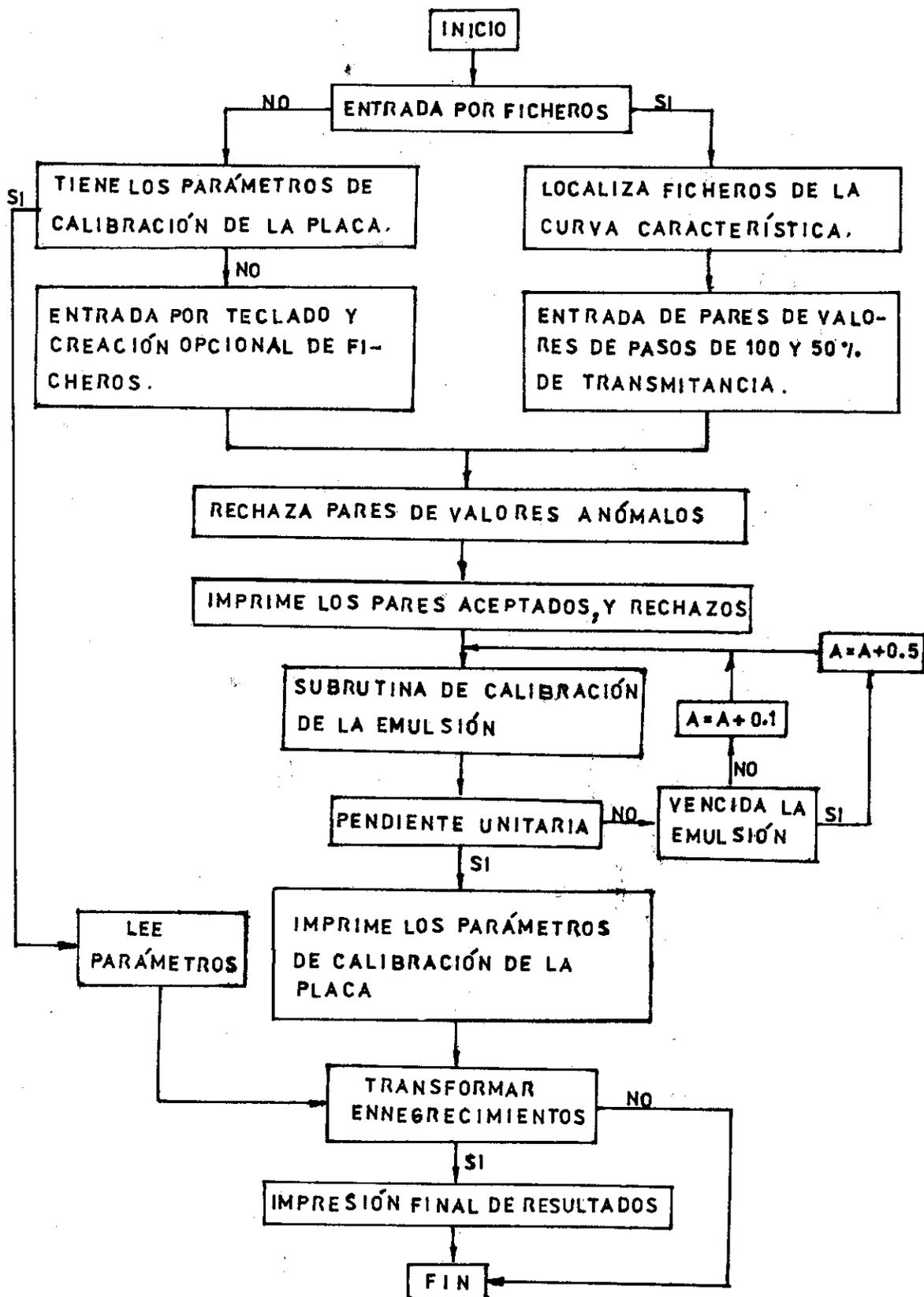


Figura 1. Diagrama general del algoritmo para la calibración de fotoplacas.

de revelado, ambientales, y otras. Con los equipos que han ensayado en diferentes laboratorios los autores de este trabajo siempre alcanzaron el mismo efecto de linealización que el obtenido por Blevins.

Un hecho relevante en esta aplicación no reportado con anterioridad es que se encontró que la magnitud de la constante de transformación (ecuación 2) depende del tipo de emulsión y es un indicador del vencimiento del material fotográfico y de errores durante el proceso de revelado.

Para emulsiones duras como la de las placas WU-3, por ejemplo, la magnitud de la constante A oscila en 7 ± 3 unidades relativas. Una magnitud mayor al límite superior del intervalo es un indicador de que el material fotográfico está vencido, o se han presentado dificultades con el procesamiento del mismo.

En la Tabla I se registran los parámetros de calibración de Placas WU-3 (ORWO-RDA).

Tabla I. Parámetros de calibración de emulsiones de fotoplacas WU-3 (ORWO).

Fecha de fotografía	A	M	Log C ₂
Abril/1988	6.00	0.7433	0.7072
Mayo./1988	7.30	0.6796	0.6461
Junio/1988	5.40	0.8532	0.8120
Julio/1988	5.00	0.6670	0.6349
Sept./1988	8.50	0.7485	0.7112
Oct. /1988	11.70	0.7157	0.6790
Nov. /1988	13.00	0.7388	0.7004
Dic. /1988	14.90	0.7748	0.7339
Enero/1989	15.00	0.7611	0.7208

A = Constante de transformación.

M, Log C₂ = pendiente e intercepto de la función de calibración de la fotoplaca.

La emulsión de las fotoplacas debía vencer en marzo de 1988 según el fabricante. Y como puede observarse, la respuesta de la emulsión fotográfica resulta anómala a partir del mes de septiembre de 1989. El cambio en la constante de transformación, en este ejemplo, es un indicador del envejecimiento del material fotográfico.

Hace más de cinco años que el algoritmo del programa se emplea para la conversión a logaritmos de intensidades relativas con resultados satisfactorios. Con referencia a un trabajo anterior^{8, 11/} debe señalarse que el algoritmo^{8, 11/} ha significado un paso de avance en cuanto a

calidad, ahorro de memoria en el procesador, y a fiabilidad en los cálculos. El nuevo programa al ser más compacto permite mayores facilidades. En la Tabla II se muestran los resultados de la transformación de un conjunto de ennegrecimientos a logaritmo de intensidades relativas.

Tabla II. Impresión de resultados de la conversión a logaritmos de intensidades relativas.

Línea analítica= V 2924.644		Buffer= Grafito + LiF (2X)					
No.	SLBU	SU	LOG ILBU	LOG ILB	LOG IU	LOG ILB/IU	LOG(IL/IUP)
1	148	26	1.8218	1.7934	0.6238	1.1696	0.8777
2	152	30	1.8591	1.8290	0.6847	1.1443	0.9163
3	154	28	1.8779	1.8511	0.6550	1.1961	0.9401
4	156	29	1.8969	1.8703	0.6700	1.2003	0.9606
5	134	28	1.6943	1.6527	0.6550	0.9978	0.7226
Media=			1.830	1.799	0.658	1.142	0.883
Des. TPCA=			0.0808	0.0868	0.023	0.0835	0.095
Señal-ruido=			22.66	20.73	29.07	13.67	9.30
D.TPCA.Rel. (%)=			4.41	4.82	3.44	7.32	10.76
Normalidad			Si	Si	Si	Si	Si

LOG ILBU	LOG ILB	LOG IU	LOG(ILB/IU)	LOG(IL/IUP)
***	***	0.6238	***	***
1.8218	1.7934	0.6847	1.1443	0.8777
1.8591	1.8290	0.6550	1.1696	0.9163
1.8779	1.8511	0.6700	1.1961	0.9401
1.8969	1.8703	0.6550	1.2003	0.9606

*** --> VALOR RECHAZADO POR SMIRNOV-GROUBBS (P=95%)

	MEDIA	DESV. TPCA	SEÑAL-RUIDO	DTR (%)
LOG ILBU	1.684	0.0320	58.20	1.72
LOG ILB	1.836	0.0330	55.61	1.80
LOG IU	0.658	0.0226	29.07	3.44
LOG(ILB/IU)	1.178	0.0260	45.29	2.21
LOG(IL/IUP)	0.924	0.0356	25.92	3.85

El significado de los caracteres utilizados es el siguiente:

S → se refiere al ennegrecimiento medido en el microfotómetro.

I → es la intensidad relativa de la línea analítica o del fondo espectral.

L → es la denominación de la línea.

B → sirve para designar al blanco.

U → denominación del fondo espectral cercano a la línea analítica

así, LOG ILBU se refiere al logaritmo de la intensidad de la línea con las contribuciones debidas al blanco y al fondo cercano a la misma^{/12/}.

Como se observa de la Tabla II, el ordenador imprime el valor medio, la desviación típica, la desviación típica relativa, y la magnitud de la señal-ruido, definida esta como la relación entre la señal ($\text{Log } I_{LB}$, $\text{Log } I_u$, y otros) y la fluctuación estadística (desviación típica) de la misma. El rechazo de observaciones anómalas se realiza con el estadígrafo de Smirnov-Groubbs con $p=95\%$, y es una opción del usuario. La normalidad de la distribución de la magnitud aleatoria con la prueba de Shapiro-Wilk.

La penúltima columna de la tabla es la relación de I_{LB} respecto a la intensidad del fondo adyacente (I_u) a la línea, función que se emplea para la selección de reguladores espectroquímicos de la excitación. Pero la última corresponde a la relación de la línea corregida para el blanco respecto a la intensidad del fondo promedio (I_{UP}). La corrección para el blanco y la utilización del fondo promedio en un lugar fijo del espectro como referencia analítica útil han sido expresadas en literatura^{/12/}, siendo obtenidas del experimento en blanco.

5. CONCLUSIONES

El algoritmo programado permitió elaborar un sistema de cálculo muy útil para las investigaciones preliminares en Espectrografía de Emisión Atómica con toda una serie de facilidades que economizan el tiempo de trabajo en el laboratorio y aumentan la fiabilidad estadística de los resultados. El cálculo de la constante de transformación ofrece una información cuantitativa del vencimiento del material fotográfico y/o los errores en el trabajo realizado con el mismo durante el proceso de revelado/fijado de la fotoplaca.

6. BIBLIOGRAFÍA

1. Carnevale, A.; A. J. Lincoln (1969). *Spectrochim. Acta*, 24 B, 313.
2. Margoshes, M.; S. D. Rasberry (1969). *Spectrochim. Acta*, 24 B, 497.
3. Torok, T.; J. Mika (1978). *Emission Spectrochemical Analysis*. Adam Hilger-Akadémiai Kiado, Budapest, 692 pp.
4. Riveron, A. M.; G. Francisco; F. Berty Pérez; J. A. González Alonso (1981). *Revista Ciencias Químicas*, 12, 1.
5. Decker, R. J.; D. J. Eve (1970). *Spectrochim. Acta*, 25 B, 479.
6. Shoaeb, A. M.; M. S. Helmi; I. M. Elgamal (1983). *Spectrochim. Acta*, 38 B, 1005.
7. Shoaeb, A. M.; M. S. Helmi; E. M. El Sherbiney (1986). *J. of Anal. Atom. Spectrometry*, 1, 157.
8. Blevins, D. R.; W. R. O'Neill (1976). *Appl. Spectrosc.*, 30, 190.

9. IUPAC (1974). *Commission on Spectrochemical and other optical procedures for analysis*. *Appl. Spectrosc.*, 28, 410.
10. Zaidel, A. N.; G. V. Ostrovskaya; Yu. I. Ostrovski (1979). *Técnica y Práctica de Espectroscopia*, Ed. Mir, Moscú, 413 pag.
11. Berty, Pérez Fernando (1987). *Tesis de disertación de Candidato a Doctor*, UH, Ciudad Habana.
12. Boumans, PWJM; Maessen FJMJ (1967). *Z. Anal. Chem.* 225, 98.

Sobre la difracción de una onda electromagnética en un sistema de ranuras. Caso plano

José Marín Antuña, Vladimir Martínez Santana

RESUMEN

En la teoría y la técnica de las antenas de ranura es de gran interés la solución del problema sobre la radiación de ondas electromagnéticas desde un sistema de ranuras en la pared de una guía de ondas. Continuando un trabajo anterior, los autores resuelven de forma exacta este problema con la ayuda de la teoría de las ecuaciones integrales y de las modernas técnicas de computación.

ABSTRACT

The theory and technical applications of cleft antenna are very interesting for the solution of the problem of radiation of electromagnetic waves from a system of clefts in the wall of a wave guide. The authors continue a precedent paper and resolve exactly this problem using the theory of integral equations and the modern computational methods.

INTRODUCCIÓN

La utilización en la técnica de líneas de comunicación formadas por guías de ondas [1], de uniones complejas de ranuras en guías de ondas [2,3] y de sistemas de ranuras irradiantes [4] conduce al estudio del

problema de la unión electromagnética entre dos volúmenes a través de una o varias ranuras. El empleo de líneas de comunicación formadas por guías de ondas ha pasado a ser -con el desarrollo de la física de semiconductores, la óptica, la cristalografía y la tecnología de circuitos integrados entre otros- una técnica cotidiana. En un trabajo anterior [5] se presenta un algoritmo para la solución del problema sobre la radiación de energía a través de una ranura practicada en la pared de una guía de ondas en el que la combinación acertada de la teoría de ecuaciones integrales y las posibilidades de las técnicas modernas de computación permitieron dar una solución acabada al problema que anteriormente sólo recibía un tratamiento generalmente aproximado y asintótico. En la presente publicación presentamos una generalización de dicho cálculo al caso en que en la pared de la guía de ondas están practicadas varias ranuras.

1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Sea un sistema formado por dos guías de ondas de ancho a_1 y a_2 respectivamente constituidas por placas planas infinitas y conductoras perfectas (Figura 1). Consideramos el sistema al vacío y que en la placa central hay Q ranuras de ancho $l(p)$; $b(p)$ es la distancia de la ranura p a la ranura $p+1$. Por la guía inferior se propaga desde $-\infty$ una onda de componentes E_x , E_z y H_y no nulas; las restantes componentes son nulas. La componente H_y la supondremos

$$H_y = u(x, z) = Ae^{i\gamma_m z} \cos \alpha_m x \quad (1)$$

donde A es la amplitud, $\gamma_m^2 = k^2 - \alpha_m^2$, k es el vector de onda y $\alpha_m = m\pi/a_2$ (m es un número fijo dado). Aquí hemos considerado la dependencia temporal como $\exp(-i\omega t)$ ($\text{Im } \gamma_m > 0$), donde ω es la frecuencia de la onda.

Nuestro objetivo es determinar los campos resultantes producto de la difracción de esta onda al incidir en el sistema de ranuras de la pared central que separa a las dos guías. Matemáticamente, el problema se reduce a resolver la ecuación de Helmholtz.

$$\nabla^2 u + k^2 u = 0 \quad (2)$$

con las condiciones

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=a_1} = 0 \quad \forall z$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=-a_2} = 0 \quad \forall z \quad (3)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad \forall z \leq 0 \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad \forall z \in \left\{ 1(p) + \sum_{j=1}^{p-1} [1(j)+b(j)], \sum_{j=1}^p [1(j)+b(j)] \right\} \quad (5)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = f_p(z) \neq 0 \quad \forall z \in \left\{ \sum_{j=1}^{p-1} [1(j)+b(j)], \sum_{j=1}^p [1(j)+b(j)] \right\} \quad (6)$$

donde $f_p(z)$ es la componente E_z en la p -ésima ranura. La solución debe, además, cumplir las condiciones de radiación [5,6]

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sqrt{r} \left(\frac{\partial u}{\partial r} - iku \right) = 0 \quad \forall x > 0 \quad \text{si } a_1 = \infty \quad (7)$$

$$u(x, z) = Ae^{i\gamma_m z} \cos \alpha_m x + \sum_{n=1}^{\infty} R_n e^{-i\gamma_n z} \cos \alpha_n x \quad (8)$$

para $z \leq 0$

$$u(x, z) = \sum_{n=1}^{\infty} T_n e^{i\gamma_n z} \cos \alpha_n x \quad (9)$$

para $z \geq \sum_{j=1}^Q [1(j)+b(j)] \cap x \in (-a_2, 0)$

que tienen el sentido físico de la ausencia de ondas provenientes desde el infinito, salvo la onda incidente.

Nuestro problema consiste en determinar los coeficientes R_n y T_n y el campo en la guía superior. Las expresiones que se obtienen son:

$$R_n = \frac{i}{\gamma_n a_2} \sum_{p=1}^Q (-1)^{n+1} \int_{I(p)}^{D(p)} e^{i\gamma_n z} f_p(z) dz \quad (10)$$

$$T_n = A \delta_{nm} + \frac{i}{\gamma_n a_2} \sum_{p=1}^Q (-1)^n \int_{I(p)}^{D(p)} e^{-i\gamma_n z} f_p(z) dz \quad (11)$$

donde hemos introducido la notación

$$D(p) = 1(p) + \sum_{j=1}^{p-1} [1(j)+b(j)], \quad I(p) = \sum_{j=1}^{p-1} [1(j)+b(j)] \quad (12)$$

El campo en el volumen superior tiene la forma

$$u(x, z) = \sum_{p=1}^Q \int_{I(p)}^{D(p)} f_p(\xi) G(x, z; 0, \xi) d\xi \quad (13)$$

donde G es la función de Green, solución del problema

$$\nabla^2 G + k^2 G = -\delta(x-x_0) \delta(y-y_0) \quad (14)$$

$$\left. \frac{\partial G}{\partial n} \right| = 0 \quad \text{sobre las paredes} \quad (15)$$

y que se expresa por las ecuaciones

$$G(x, z; \xi, \zeta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\pi i}{a_1 \sigma_n} \cos \frac{n\pi x}{a_1} \cos \frac{n\pi \xi}{a_1} e^{i\sigma_n |z-\zeta|} \quad (16)$$

en el caso en que a_1 es finito; $\sigma_n^2 = k^2 - \left(\frac{n\pi}{a_1}\right)^2$, y

$$G(x, z; \xi, \zeta) = \frac{i}{4} \left[H_0^{(1)} \left(kr_{MP} \right) + H_0^{(1)} \left(kr_{MP'} \right) \right] \quad (17)$$

en el caso en que a_1 es infinito. $P=(\xi, \zeta)$, $P'=(-\xi, \zeta)$.

2. PATRÓN DE EMISIÓN

En el caso en que el volumen superior sea un semi espacio ($a_1 = \infty$) tiene interés el cálculo del patrón de emisión (diagrama direccional) del campo irradiado por la antena formada por el sistema de ranuras. Esto significa hallar la componente angular del campo irradiado para distancias muy grandes del sistema de ranuras ($r \rightarrow \infty$). Tomando las fórmulas asintóticas y realizando los cálculos correspondientes, se obtuvo la expresión siguiente para el patrón de emisión del sistema de ranuras

$$\phi(\phi) = \sum_{p=1}^Q \frac{D(p)}{I(p)} \int f_p(\zeta) e^{ik \left[\zeta - \frac{D}{2} \right] \sin \phi} d\zeta \quad (18)$$

donde $D = \sum_{p=1}^Q [l(p) + b(p)]$ es la longitud total del sistema de ranuras. La fórmula (18) nos da el patrón de emisión en un sistema de coordenadas cuyo origen se encuentra en el centro del sistema de ranuras (Figura 2).

3. REDUCCIÓN DEL PROBLEMA A UNA ECUACIÓN INTEGRAL

La solución del problema (2)-(6) puede expresarse en términos de la función de Green de la siguiente manera:

$$u(x, z) = Ae^{i\gamma_n z} \cos \alpha_n x - \sum_{p=1}^Q \int \frac{D(p)}{I(p)} f_p(\zeta) G_2(x, z; 0, \zeta) d\zeta \quad (19)$$

para la guía inferior, y

$$u(x, z) = \sum_{p=1}^Q \int \frac{D(p)}{I(p)} f_p(\zeta) G_1(x, z; 0, \zeta) d\zeta \quad (20)$$

para la región superior, donde G_1 y G_2 son las funciones de Green correspondientes. Exigiendo la continuidad de la solución sobre cada una de las ranuras ($x=0$, $z \in [I(p), D(p)]$) se obtiene la siguiente ecuación integral para las funciones f_p

$$(-1)^m A e^{i\gamma_m z} = \sum_{p=1}^{\infty} \int_{I(p)}^{D(p)} f_p(\zeta) K(z, \zeta) d\zeta \quad (21)$$

donde $K(z, \zeta) = G_1 + G_2$. La ecuación (21) es una ecuación integral de Fredholm de primer tipo que, sin embargo, es un problema correcto debido a que su núcleo tiene una singularidad regularizadora sobre la diagonal $\zeta = z$, ya que es la suma de dos funciones de Green [7].

4. RESULTADOS OBTENIDOS

Para resolver la ecuación (21) la llevamos a un sistema de ecuaciones algebraicas de forma análoga a lo reportado en [5] y utilizamos las técnicas de solución con la ayuda de algoritmos de computación. Los resultados obtenidos se ofrecen en los gráficos que a continuación se exponen.

En los cálculos graficados supusimos el volumen superior infinito y la guía inferior de ancho $a_2 = A$ y, además, todas las ranuras de igual ancho L y equidistantes. En las figuras (3.a) y (3.b) se muestra el patrón de emisión para el caso $A=L$ calculado para un sistema de dos y de cuatro ranuras, superpuestos al calculado para una ranura: este último coincide exactamente con lo reportado en [5], como era de esperar. La Figura (4) muestra superpuestos los patrones de emisión de una, dos, tres y cuatro ranuras para $A=10L$ y la Figura (5) los mismos resultados para $A=100L$. En este último caso en el que las ranuras son muy estrechas en comparación con las dimensiones de la guía inferior, no es apreciable la direccionalidad del patrón, lo que experimentalmente es conocido. Las Figuras (6.a) y (6.b) muestran, a modo de ejemplo, los gráficos del módulo de las funciones $f_p(\zeta)$ (componente E_z del campo en las ranuras) para una y varias ranuras en el caso $A=L$. Aquí se aprecia claramente la singularidad del tipo $[(x-I(p)(x-D(p)))]^{-1/2}$ que dichas funciones deben tener en los bordes de las ranuras, en correspondencia con la condición de Meissner para la difracción en el borde agudo de una pantalla [8].

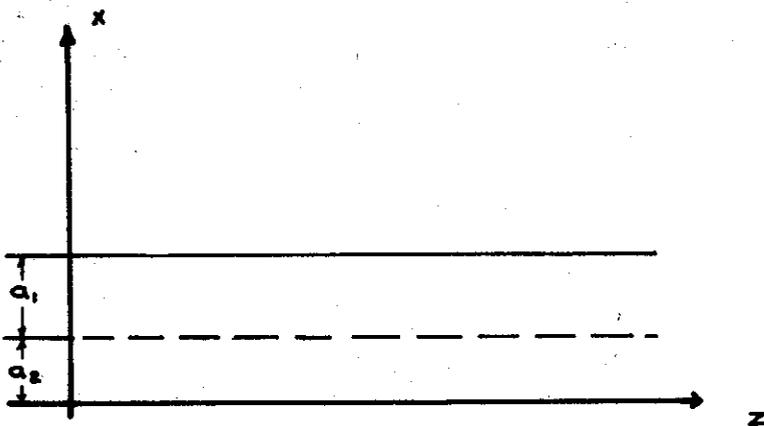
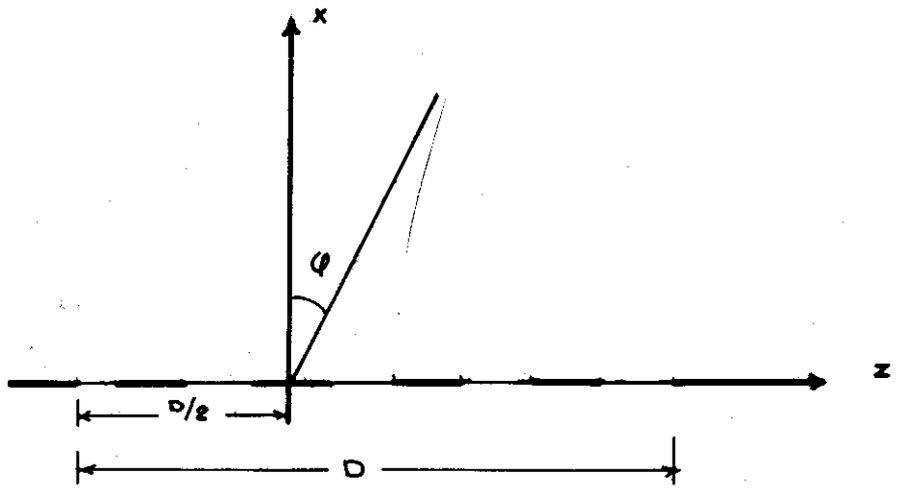


Figura 1.

Figura 2.



A=L

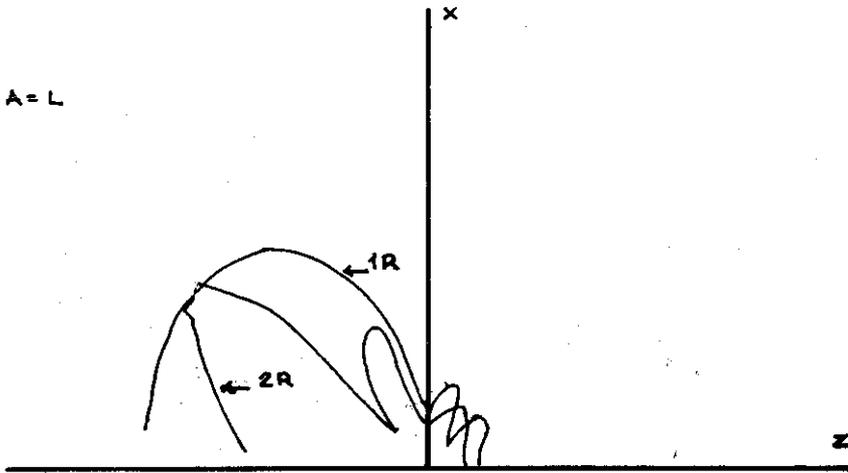
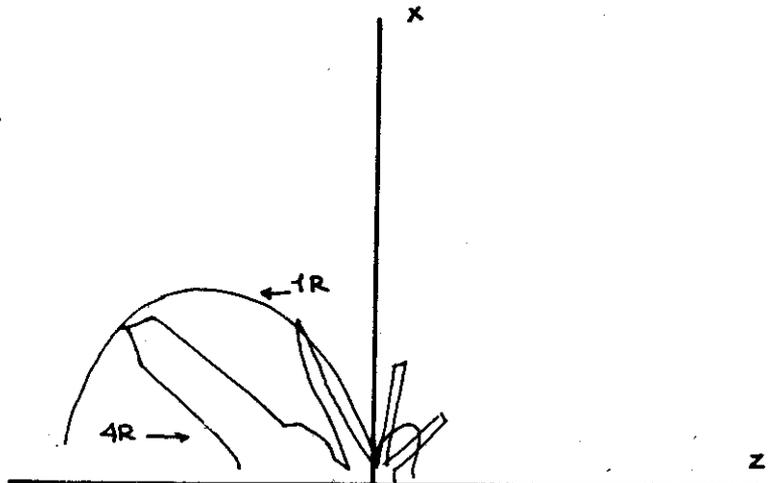


Figura 3a.

A=L

Figura 3b.



$A=10L$

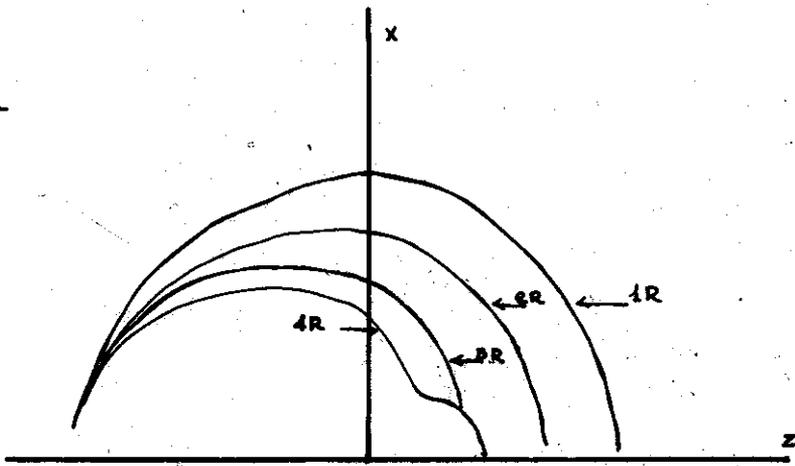


Figura 4.

$A=100L$

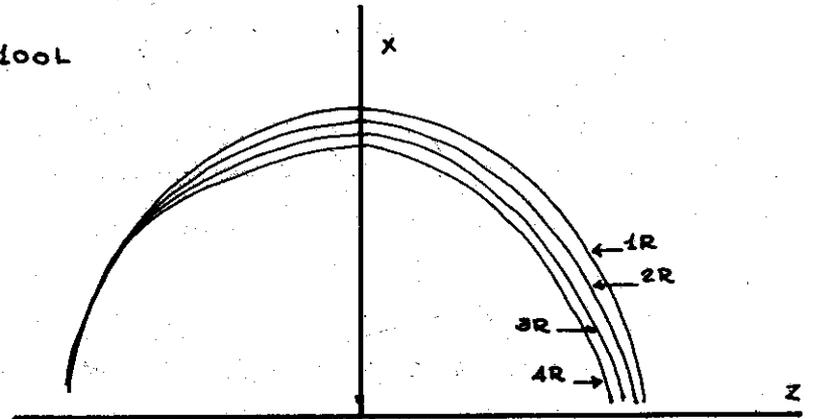


Figura 5.

$A=L$

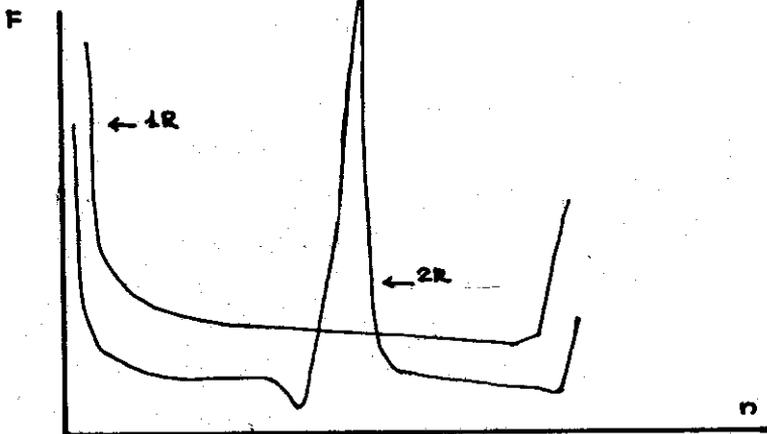


Figura 6a.

$A=L$

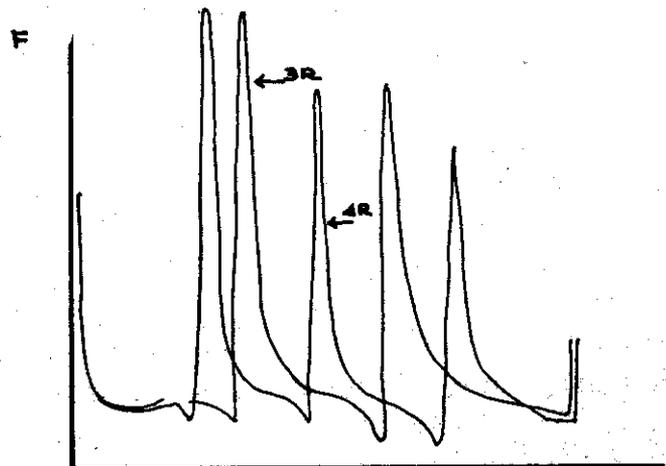


Figura 6b.

BIBLIOGRAFÍA

1. Kaznacheiev, Y. I. (1959). *Comunicaciones de larga distancia en guías de ondas*. Moscú. Editorial de la AC de la URSS.
2. Levinson, I. B.; P. S. Fridberg (1966). *Uniones de ranuras en guías de ondas rectangulares homogéneas*. Radiotécnica y Electrónica, tomo 11,5, 831-838; Radiotécnica y Electrónica, tomo 11,6, 1076-1085.
3. Dorfman, L. G.; V. V. Filatov (1966). *Sobre los parámetros eléctricos de los puentes de ranura en guías de ondas*. Radiotécnica y Electrónica, tomo 11,11, 1933-1943.
4. Evstropov, G. A.; S. A. Tsarapin (1966). *Cálculo de antenas de ranura en guías de ondas, teniendo en cuenta la interacción de los emisores respecto a la onda principal*. Radiotécnica y Electrónica, tomo 11,5, 822-830.
5. Marín Antuña, J. (1988). *Sobre la radiación de una ranura en una guía de ondas plana*. Revista Cubana de Física, Vol. VIII, No. 3, 14.
6. Sviéshnikov, A. G. (1950). *El principio de Radiación*. Doklady AN SSSR, 73, 5,.
7. Tíjonov, A. N. (1963). *Sobre la solución de problemas incorrectamente planteados y un método de regularización*. Doklady AN SSSR, 151, 3, 501-504.
8. Noble, B. (1962). *El método de Wiener-Hopf*. Moscú, I. L.

Tiempo de relajación para mecanismos de dispersión fonónica en sistemas semiconductores de baja dimensionalidad

F. Comas, C. Trallero-Giner, J. Tutor y H. León, Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana

RESUMEN

En el presente trabajo se muestra un estudio sistematizado de los tiempos de relajación de electrones dispersados por fonones acústicos, piezoeléctricos, ópticos no polares y ópticos polares en heteroestructuras cuasiunidimensionales (Q1D) y cuasibidimensionales (Q2D). Se analizan los límites Q1D \rightarrow Q2D y Q2D \rightarrow 3D. Se comparan los cálculos realizados con resultados obtenidos por otros autores y se resalta la simetría de las expresiones obtenidas al comparar las mismas para diversos mecanismos de dispersión fonónica. También se discuten las condiciones de validez del llamado límite cuántico dimensional (cuando se supone que las transiciones ocurren sólo en la primera subbanda), así como de la aproximación de conservación del momento en la dirección perpendicular a las heterojunturas.

ABSTRACT

This work is devoted to a systematic investigation of electron relaxation times in quasi-one-dimensional (Q1D) and quasi-two-dimensional (Q2D) semiconductor heterostructures. Scatterings by acoustic phonons, via deformation potential and piezoelectric couplings, as well as by polar and non-polar optical phonons are considered. The limits Q1D \rightarrow Q2D and

Q2D → 3D are analysed. Our results are compared with previous results. Momentum-conservation approximation and size-quantum-limit approximation are discussed.

I. INTRODUCCIÓN

En la actualidad se manifiesta un marcado interés en el estudio de sistemas cuasiunidimensionales (Q1D) y cuasibidimensionales (Q2D) en materiales semiconductores. Heteroestructuras (HS) semiconductoras Q1D han sido fabricadas o propuesta su fabricación por diversos autores /1-5/; se han realizado mediciones de movilidad Hall en diferentes HS semiconductoras Q2D /8-11/. Haciendo uso de dopajes modulados, inclusión de capas espaciadoras semiconductoras, y alto grado de purificación durante el proceso de crecimiento se han alcanzado altas movilidades del orden de $10^6 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$. En tales condiciones para los sistemas semiconductores de baja dimensionalidad, la interacción electrón-fonón es el mecanismo predominante en la limitación de los valores de la movilidad, y la llamada cuantificación espacial es el hecho físico fundamental que determina el comportamiento de los portadores de carga. Aparte del confinamiento electrónico, existe otro importante efecto que puede ser trascendente en las propiedades de transporte y las propiedades ópticas, tal es el confinamiento fonónico /12/. Este último efecto tiene una vital importancia en el mecanismo de dispersión por fonones ópticos polares. No obstante la aproximación de fonones tridimensionales usada en nuestro trabajo, funciona aceptablemente para la mayoría de los mecanismos de dispersión: fonones acústicos, piezoeléctricos y ópticos no polares. En el caso de mecanismos de dispersión por fonones ópticos polares, la aproximación de fonones tridimensionales es aceptable siempre que las temperaturas sean lo suficientemente bajas o altas.

Usando la aproximación del tiempo de relajación en la teoría de transporte de Boltzmann, para movimiento de portadores paralelo a las intercaras en sistema Q1D /13-18/ y Q2D /18-24/, se han realizado cálculos de movilidad Ohmica; igualmente, usando la llamada rapidez de dispersión (scattering rate) /16,20,25,26/ se calcularon movilidades Ohmicas. El mecanismo de dispersión por fonones acústicos ha sido investigado en sistemas Q1D /16,17,18/ y Q2D /18,21,22/; la dispersión por fonones piezoeléctricos ha sido investigada en sistemas Q1D /17,18/ y Q2D /6,19,20,23/; la dispersión por fonones ópticos no polares ha sido estudiada en sistemas Q2D /27-29/, y por último, la interacción electrón-fonón óptico polar ha sido investigada en sistemas Q1D /16,30,31/ y Q2D /25,26,30,31,32/ sobre la base de modelos tridimensionales.

El objetivo del presente trabajo consiste en hacer un resumen sistematizado del tiempo de relajación para los mecanismos de dispersión

fonónicas más relevantes y destacar algunos ejemplos comparativos que permiten caracterizar algunas de las propiedades más importantes de estos mecanismos en sistemas semiconductores de baja dimensionalidad.

En la Sección II se presenta el modelo teórico que sirve de base en nuestros cálculos así como se definen los parámetros fundamentales a utilizar. La Sección III se dedica al cálculo de los tiempos de relajación. Una discusión resumen de los mecanismos estudiados y su incidencia en las propiedades de transporte en sistemas de baja dimensionalidad se presenta en la Sección IV.

II. MODELO

Suponemos que los electrones están confinados en un alambre rectangular con lados a y b en el caso Q1D; o en una capa de espesor a en el caso Q2D. Las funciones de onda electrónicas serán:

$$|\vec{k}\rangle = |\vec{k}_{\parallel}\rangle |\vec{k}_{\perp}\rangle \quad (1)$$

donde:

$$\langle \vec{k}_{\parallel} | \vec{k}_{\parallel} \rangle = \begin{cases} L^{-1/2} \exp(iK_z z) & ; \text{Q1D} \\ S^{-1/2} \exp[i(K_y y + K_z z)] & ; \text{Q2D} \end{cases} \quad (2)$$

$$\langle \vec{k}_{\perp} | \vec{k}_{\perp} \rangle = \begin{cases} \frac{2}{(ab)^{1/2}} \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{l\pi y}{b} & ; \text{Q1D} \\ \frac{2}{a^{1/2}} \sin \frac{n\pi x}{a} & ; \text{Q2D} \end{cases} \quad (3)$$

siendo L el largo del alambre y S el área de la capa; $n = 1, 2, 3, \dots$ y $l = 1, 2, 3, \dots$. Los subíndices " \parallel " (" \perp ") se refieren a las componentes de \vec{r} y \vec{k} paralela (perpendicular) a la heterojuntura.

Los correspondientes valores de energía son:

$$E = E_{\vec{k}_{\perp}} + E_{\vec{k}_{\parallel}} \quad (4)$$

donde:

$$E_{\vec{k}_{\parallel}} = \begin{cases} \frac{\hbar K_z^2}{2 m^*} & ; \text{Q1D} \\ \frac{\hbar^2}{2 m^*} (K_y^2 + K_z^2) & ; \text{Q2D} \end{cases} \quad (5)$$

$$E_{\vec{k}_{\perp}} = \begin{cases} n^2 E_{0a} + l^2 E_{0b} & ; \text{Q1D} \\ n^2 E_{0a} & ; \text{Q2D} \end{cases} \quad (6)$$

siendo $E_{0a} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m^* a^2}$, $E_{0b} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m^* b^2}$ y m^* la masa efectiva del electrón. Obsérvese que el confinamiento de los electrones en la dirección

perpendicular a la heterojuntura se ha modelado como el movimiento en un pozo rectangular infinito bidimensional en el caso Q1D y unidimensional en el caso Q2D.

En nuestro modelo, usaremos como Hamiltoniano de interacción electrón-fonón el siguiente:

$$H = \sum_{\vec{q}, j} H_{\vec{q}, j}^+ = \sum_{\vec{q}, j} \left\{ C_{\vec{q}, j}^+ e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} b_{\vec{q}, j}^+ + H.C \right\} \quad (7)$$

donde $C_{\vec{q}, j}^+$ es el factor de acoplamiento (electrón-fonón) y $b_{\vec{q}, j}^+$ ($b_{\vec{q}, j}^+$) es el operador de aniquilación (creación) de un fonón de vector de onda \vec{q} . El subíndice j se refiere a los modos de polarización del fonón ($j = L, T$); L caracteriza los modos longitudinales, mientras T caracteriza los modos transversales de polarización.

Las expresiones de $C_{\vec{q}, j}^+$ para cada uno de los mecanismos de dispersión fonónicos que consideramos son las conocidas para el caso 3D /34, 35/ y utilizadas en /18/.

Los elementos matriciales para la interacción electrón-fonón viene dada por:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}, N_{\vec{q}, j}^+ + 1/2 \mp 1/2 | H_{\vec{q}, j}^+ | N_{\vec{q}, j}^+, \vec{k} \rangle = & \left[N_{\vec{q}, j}^+ + 1/2 \mp \right. \\ & \left. \mp 1/2 \right]^{1/2} \otimes \left[\frac{1 - (\mp) 1}{2} C_{\vec{q}, j}^+ + \frac{1 \mp 1}{2} C_{\vec{q}, j}^{*+} \right] G_{\vec{k}_\perp \vec{k}'_\perp \vec{q}_\perp} \otimes \\ & \otimes \delta_{\vec{k}_\parallel, \vec{k}'_\parallel \mp \vec{q}_\parallel} \end{aligned} \quad (8)$$

donde los signos + y - indican los procesos de emisión y absorción de un fonón por un electrón respectivamente.

El factor de forma $G_{\vec{k}_\perp \vec{k}'_\perp \vec{q}_\perp}$ se expresa como:

$$G_{\vec{k}_\perp \vec{k}'_\perp \vec{q}_\perp} = \begin{cases} G_{nn'}(q_x, a) G_{11'}(q_y, b) & ; Q1D \\ G_{nn'}(q_x, a) & ; Q2D \end{cases} \quad (9)$$

donde utilizando la aproximación de conservación del momentum (MCA) tendremos /27/:

$$\begin{aligned} G_{nn'}(q_x, a) = & (1/2) [\delta_{q_x, < n-n' > \pi/a} + \delta_{q_x, - < n-n' > \pi/a} - \\ & - \delta_{q_x, < n+n' > \pi/a} - \delta_{q_x, - < n+n' > \pi/a}] \end{aligned} \quad (10)$$

teniéndose para $G_{11'}(q_y, b)$ una expresión similar.

Para los fonones piezoeléctricos y acústicos supondremos válida la siguiente relación:

$$N_{\vec{q},j} + 1/2 \pm 1/2 \approx \frac{K_B T}{\hbar \omega_{\vec{q},j}} \quad (11)$$

mientras que para los fonones ópticos polares y ópticos no polares:

$$N_{\vec{q},j} = \left[\exp(\hbar \omega_{\vec{q},j} / K_B T) - 1 \right]^{-1} \quad (12)$$

Como se sabe, la probabilidad de transición de un estado \vec{K} a un estado \vec{K}' se calcula según la regla de Oro de Fermi:

$$W_j^{\pm}(\vec{K}, \vec{K}') = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}} \left| \langle \vec{K}', N_{\vec{q},j} + 1/2 \pm 1/2 | H_{\vec{q},j} | N_{\vec{q},j}, \vec{K} \rangle \right|^2 \otimes \delta(E' - E \pm \hbar \omega_{\vec{q},j}) \quad (13)$$

Siempre que los procesos de dispersión puedan considerarse como elásticos ($\hbar \omega_{\vec{q},j} \ll E$), es posible calcular a partir de (13) el tiempo de relajación $\tau_{\vec{K}}$ incluyendo las transiciones inter e intra sub-banda de acuerdo con la expresión:

$$\frac{1}{\tau_{\vec{K}}} = \sum_{\vec{K}', j} \left\{ W_j^-(\vec{K}, \vec{K}') + W_j^+(\vec{K}, \vec{K}') \right\} \otimes \left(1 - \frac{K'}{K} \cos \theta \right) \quad (14)$$

donde θ es el ángulo de dispersión entre \vec{K}_{\parallel} y \vec{K}'_{\parallel} (en el caso Q1D $\theta = 0, \pi$). En la expresión (14) el factor de spin no ha sido considerado, lo que implica la inclusión de un factor 2 en las fórmulas de concentración de portadores y densidades de corrientes /33/.

III. TIEMPO DE RELAJACIÓN

Los tiempos de relajación relativos pueden ser descritos por medio de las siguientes magnitudes:

$$Y_{nl} = \frac{\tau_{nl}^{-1}}{\tau_0^{-1}} \quad ; \quad Y_n = \frac{\tau_n^{-1}}{\tau_0^{-1}} \quad ; \quad Y = \frac{\tau^{-1}}{\tau_0^{-1}} \quad (15)$$

en los casos Q1D (con electrones ocupando inicialmente la sub-banda $n, 1$), Q2D (con electrones ocupando inicialmente la sub-banda n) y 3D respectivamente; τ_0^{-1} es una constante dependiente de la temperatura, diferente para cada tipo de mecanismo de dispersión; τ_{nl}^{-1} y τ_n^{-1} se calcularon empleando (14).

También introducimos magnitudes de energías relativas de la siguiente manera:

$$x = \frac{E}{K_B T} \quad ; \quad \alpha = \frac{E_{0a}}{K_B T} \quad ; \quad \beta = \frac{E_{0b}}{K_B T} \quad (16)$$

A continuación mostraremos las expresiones de τ_0^{-1} para cada uno de los mecanismos que presentaremos en nuestro trabajo y que serán utilizados en las expresiones de Y_{nl} , Y_n y Y respectivamente.

Mecanismo de Dispersión	τ_0^{-1}
Fonón Acústico	$\tau_{0DP}^{-1} = \frac{2^{\frac{1}{2}}}{\pi} \frac{D_{ac}^2 (m^*)^{3/2} (K_B T)^{3/2}}{\rho s_L^2 h^4}$
Fonón Piezoeléctrico	$\tau_{0Pz}^{-1} = \frac{16 \pi (2m^*)^{\frac{1}{2}} e^2 \gamma^2 (K_B T)^{\frac{1}{2}}}{15 h^2 \epsilon^2} \otimes$ $\otimes (s_L^{-2} + 2 s_T^{-2})$
Fonón Óptico No polar	$\tau_{0ONP}^{-1} = \frac{1}{2^{\frac{1}{2}} \pi} \frac{E_{d0}^2 (m^*)^{3/2} h \omega_0 (K_B T)^{\frac{1}{2}}}{\rho s_L^2 h^4}$
Fonón Óptico Polar	$\tau_{0OP}^{-1} = \frac{1}{2^{\frac{1}{2}}} \frac{e^2 (m^*)^{\frac{1}{2}} (\epsilon_{\infty}^{-1} - \epsilon_0^{-1}) h \omega_0}{h^2 (K_B T)^{\frac{1}{2}}}$

Todos los parámetros son los usuales en la teoría de transporte /18,34, 35/.

De acuerdo con los valores de τ_0^{-1} mostrados, las expresiones de los tiempos de relajación relativos obtenidos son:

a) *Mecanismo de dispersión electrón-fonón acústico*

Para el caso Q1D /13,16,17,18/:

$$Y_{nl}^{DP} = \frac{2 \alpha^{\frac{1}{2}} \beta^{\frac{1}{2}}}{\pi} \sum_{n', l'} \frac{(1 + \frac{1}{2} \delta_{nn'}) (1 + \frac{1}{2} \delta_{ll'})}{(x - n'^2 \alpha - l'^2 \beta)^{\frac{1}{2}}} \otimes$$

$$\otimes \theta(x - n'^2 \alpha - l'^2 \beta) \theta(x - n^2 \alpha - l^2 \beta) \quad (17)$$

Para el caso Q2D /21,27/:

$$Y_n^{DP} = \alpha^{\frac{1}{2}} \sum_{n'} (1 + \frac{1}{2} \delta_{nn'}) \theta(x - n'^2 \alpha) \theta(x - n^2 \alpha) \quad (18)$$

y para el caso 3D /33,34/:

$$Y^{DP} = x^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

con $\theta(u) = 0$ si $u < 0$ y $\theta(u) = 1$ si $u > 0$.

b) Mecanismo de dispersión electrón-fonón piezoeléctrico

Para el caso Q1D /17,18/

$$Y_{nl}^{PZ} = \frac{\alpha^{\frac{1}{2}} \beta^{\frac{1}{2}}}{2\pi} \frac{1}{\Sigma} \left\{ \begin{array}{l} \Sigma \\ n', l' \end{array} \frac{(1 + m \delta_{nn'}) (1 + p \delta_{ll'})}{(x - n'^2 \alpha - l'^2 \beta)^{\frac{1}{2}}} \right\} \otimes$$

$$\otimes \left\{ \frac{B_{nn'}^{ll'}(m,p) - A_{nn'}^{ll'}}{[(B_{nn'}^{ll'}(m,p) + A_{nn'}^{ll'}) + 4(x - n'^2 \alpha - l'^2 \beta) B_{nn'}^{ll'}(m,p)]} \right\} \otimes$$

$$\otimes \Theta(x - n'^2 \alpha - l'^2 \beta) \Theta(x - n'^2 \alpha - l'^2 \beta) \quad (20)$$

donde:

$$A_{nn'}^{ll'} = \alpha(n^2 - n'^2) + \beta(l^2 - l'^2) \quad (21)$$

y:

$$B_{nn'}^{ll'}(m,p) = \alpha [n + (-1)^m n']^2 + \beta [1 + (-1)^p l']^2 \quad (22)$$

Para el caso Q2D:

$$Y_n^{PZ} = \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{x - n^2 \alpha} \frac{1}{n'} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \delta_{nn'} - n \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{x^{\frac{1}{2}}} \right\} \Theta(x - n^2 \alpha) \otimes$$

$$\otimes \Theta(x - n^2 \alpha) \quad (23)$$

y para el caso 3D /33/

$$Y^{PZ} = x^{-\frac{1}{2}}$$

c) Mecanismo de dispersión electrón-fonón óptico no polar.

Para el caso Q1D:

$$Y_{nl}^{ONP} = \frac{2\alpha^{\frac{1}{2}} \beta^{\frac{1}{2}}}{\pi} \frac{1}{n', l'} \left(1 + \frac{1}{2} \delta_{nn'} \right) \left(1 + \frac{1}{2} \delta_{ll'} \right) \otimes$$

$$\otimes \left\{ N_q \frac{\Theta(x - n'^2 \alpha - l'^2 \beta + R)}{(x - n'^2 \alpha - l'^2 \beta + R)^{\frac{1}{2}}} + (N_q + 1) \right\} \otimes$$

$$\otimes \left\{ \frac{\Theta(x - n'^2 \alpha - l'^2 \beta - R)}{(x - n'^2 \alpha - l'^2 \beta - R)^{\frac{1}{2}}} \right\} \Theta(x - n'^2 \alpha - l'^2 \beta) \quad (25)$$

donde $R = \frac{\hbar \omega_0}{K_B T}$

Para el caso Q2D /27/:

$$Y_n^{ONP} = \alpha^{\frac{1}{2}} \sum_{n'} (1 + \frac{1}{2} \delta_{nn'}) \left\{ N_q \Theta(x - n'^2 \alpha + R) + (N_q + 1) \Theta(x - n'^2 \alpha - R) \right\} \Theta(x - n^2 \alpha) \quad (26)$$

Para el caso 3D:

$$Y_n^{ONP} = \left\{ N_q (x + R)^{\frac{1}{2}} + (N_q + 1) (x - R)^{\frac{1}{2}} \Theta(x - R) \right\} \quad (27)$$

d) Mecanismo de dispersión electrón-fonón óptico polar

Caso Q1D:

$$Y_{n1}^{OP} = \frac{\alpha^{\frac{1}{2}} \beta^{\frac{1}{2}}}{2\pi} \sum_{m,p=0} \sum_{n',1'} (1 + m \delta_{nn'}) (1 + p \delta_{11'}) \otimes$$

$$\otimes \left\{ \frac{N_q \Theta(x - n'^2 \alpha - 1'^2 \beta + R) \left[B_{nn'}^{11'}(m,p) - A_{nn'}^{11'} \right]}{(x - n'^2 \alpha - 1'^2 \beta + R)^{\frac{1}{2}} \left[(B_{nn'}^{11'}(m,p) + A_{nn'}^{11'})^2 + 4(x - n'^2 \alpha - 1'^2 \beta) B_{nn'}^{11'}(m,p) \right]} \right\}$$

$$\otimes \left\{ \frac{(N_q + 1) \Theta(x - n'^2 \alpha - 1'^2 \beta - R) \left[B_{nn'}^{11'}(m,p) + A_{nn'}^{11'} \right]}{(x - n'^2 \alpha - 1'^2 \beta - R)^{\frac{1}{2}} \left[(B_{nn'}^{11'}(m,p) - A_{nn'}^{11'})^2 + 4(x - n'^2 \alpha - 1'^2 \beta) B_{nn'}^{11'}(m,p) \right]} \right\}$$

$$\otimes \Theta(x - n^2 \alpha - 1^2 \beta) \quad (28)$$

donde:

$$\mp A_{nn'}^{11'} = \alpha(n^2 - n'^2) + \beta(1^2 - 1'^2) \mp R \quad (29)$$

y:

$$B_{nn'}^{11'}(m,p) = \alpha \left[n + (-1)^m n' \right]^2 + \beta \left[1 + (-1)^p 1' \right]^2 \quad (30)$$

Caso Q2D:

$$Y_n^{OP} = \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{x - n^2 \alpha} \sum_{n'} \left\{ N_q \left[1 + \frac{1}{2} \delta_{nn'} - B_{nn'}^+(x; \alpha, \beta) - B_{nn'}^-(x; \alpha, \beta) \right] \right.$$

$$\left. (1 + \delta_{nn'}) \Theta(x - n'^2 \alpha + R) + (N_q + 1) \left[1 + \frac{1}{2} \delta_{nn'} - B_{nn'}^+(x; \alpha, R) - B_{nn'}^-(x; \alpha, R) \right] \Theta(x - n'^2 \alpha - R) \right\} \Theta(x - n^2 \alpha) \quad (31)$$

donde:

$$B_{nn'}^{\pm}(x; \alpha, R) = \frac{2n (n \pm n') + R}{\left[4 (n \pm n')^2 x \alpha + 4 n (n \pm n') \alpha R + R^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (32)$$

Caso 3D:

$$Y^{OP} = \frac{1}{x^{3/2}} \left\{ N_q \left[2 \sqrt{x'} \sqrt{x+R'} - R \ln \left(\frac{\sqrt{x+R'} + \sqrt{x'}}{\sqrt{x+R'} - \sqrt{x'}} \right) \right] + (N_q + 1) \left[2 \sqrt{x'} \sqrt{x-R'} + R \ln \left(\frac{\sqrt{x-R'} + \sqrt{x'}}{\sqrt{x-R'} - \sqrt{x'}} \right) \right] \right\} \Theta(x-R) \quad (33)$$

En todas las expresiones anteriores puede verificarse que haciendo $\beta \rightarrow 0$ en las fórmulas Y_{n1} y cambiando la suma en l' por integral en dl' entonces $Y_{n1} \rightarrow Y_n$. De manera análoga, haciendo $\alpha \rightarrow 0$ en las fórmulas de Y_n y cambiando la suma en n' por integral en dn' , entonces $Y_n \rightarrow Y$.

IV. Discusión y conclusiones

A manera de ejemplos se han presentado algunos gráficos que evidencian el comportamiento de los tiempos de relajación calculados. En la figura 1 se presenta Y_{11}^{PZ} vs x para el caso de dispersión por fonones piezoeléctricos, para $\alpha = 0.1$ y $\beta = 0.1$ (línea gruesa) en la mitad superior y $\beta = 0.01$ (línea delgada) en la mitad inferior; en la misma figura se ha incluido Y_1^{PZ} vs x para $\alpha = 0.1$ (línea de trazos). Como se observa, aparecen singularidades siempre que $E = n'^2 E_{0a} + l'^2 E_{0b}$ de acuerdo con (20) (lo que es debido a las singularidades de la densidad de estados en el modelo supuesto para el sistema Q1D, que corresponden a las transiciones intersub-bandas del tipo $(1, 1) \rightarrow (n', 1')$). Obsérvese que en la medida que β decrece, el tiempo de relajación Q1D se aproxima al Q2D. La diferencia entre Y_{11}^{PZ} y Y_1^{PZ} es menor de un 10 % para $\beta = 0.01$, excepto cuando x está muy cerca de cada singularidad. En la Figura 2 se presenta Y_1^{PZ} vs x para $\alpha = 0.1$ (línea gruesa) y $\alpha = 0.01$ (línea delgada); también se incluye Y^{PZ} vs x (línea de trazos). De nuevo aparecen discontinuidades cuando $E = n'^2 E_{0a}$ de acuerdo con (23) (debido a la densidad de estados en el modelo supuesto para el sistema Q2D correspondiendo a transiciones intersub-bandas del tipo $1 \rightarrow n'$). Obsérvese que en la medida en que α decrece, el tiempo de relajación Q2D tiende al 3D. La diferencia entre Y_1^{PZ} y Y^{PZ} es menor que un 10 % cuando $\alpha = 0.01$ si $x \geq 0.1$.

En las Figuras 3 y 4 se muestran los comportamientos de Y_{11}^{DP} y Y_1^{DP} vs x para mecanismos de dispersión por fonones acústicos cuyos comentarios son exactamente iguales a los hechos en el párrafo anterior. Comportamiento similar se manifiesta en los mecanismos de dispersión por fonones ópticos no polares y ópticos polares.

Como es conocido, en el límite cuántico dimensional (SQL), se supone que todos los electrones se encuentren en el estado básico ($n = n' = 1$ para el caso Q2D; $n = n' = 1 = l' = 1$ para el caso Q1D), lo que entraña

ciertas condiciones energéticas de validez para su cumplimiento. Si consideramos que el gas de electrones es no degenerado, puede verse de nuestro modelo, que para los mecanismos de dispersión por fonones acústicos y piezoeléctricos la condición de validez para el límite cuántico viene dada por $\alpha = (E_{0a}/K_B T) > 1/3$ (en el caso Q1D esta condición debe ir acompañada con la condición $b \leq a$); mientras que para los mecanismos de dispersión por fonones ópticos polares y ópticos no polares, la validez de la aproximación SQL en el cálculo del tiempo de relajación viene expresada por $\alpha > 1/3$ para un gas electrónico no degenerado a altas temperaturas y $\alpha > R/3$ para dicho gas a bajas temperaturas (en el caso Q1D, para ambas condiciones debe añadirse la condición $b \geq a$).

En la sección II del presente trabajo se mostró como el uso de la aproximación de conservación del momentum (MCA) para la componente q_x y q_y en el caso Q1D y q_x en el caso Q2D, se obtienen expresiones relativamente sencillas para los factores de forma $G_{nn}(q_x, a)$ y $G_{ll}(q_y, b)$ lo que brinda resultados coincidentes, en el caso Q2D con los obtenidos por Ridley y Riddoch /27, 31, 32/, así como con otros autores que utilizan la misma aproximación. Esta aproximación es aceptable para los mecanismos de dispersión por fonones acústicos y piezoeléctricos donde la interacción electrón-fonón es aproximadamente elástica; de igual forma es aceptable para los mecanismos por fonones ópticos polares y ópticos no polares en regímenes de bajas temperaturas ($h\omega_0 \gg K_B T$) ya que en estos casos la suposición MCA no es tan fuerte. Como bien señala Leburton /30/, quien calculó de forma exacta el factor de forma G para condiciones de SQL para mecanismos de dispersión por fonones ópticos polares y cuyos resultados coinciden con la data experimental de Chiu et al. /36/, la MCA sobreestima el papel del confinamiento electrónico, así como la fortaleza de la dispersión por fonones ópticos polares para temperaturas intermedias, lo que hace a esta aproximación poco realista en dicho rango de temperatura.

En este resumen sistematizado de los tiempos de relajación para mecanismos de dispersión electrón-fonón, se ha mostrado que existen comportamientos muy similares entre diversos mecanismos, lo que puede verse al comparar las expresiones analíticas de los parámetros γ . Por ejemplo, si comparamos las ecuaciones (17)-(19) con las ecuaciones (25)-(27) vemos que existe una gran simetría entre los mecanismos Acústicos y Ópticos No Polares, rota solamente por el parámetro R que aporta el carácter inelástico del proceso de conservación de energía en el caso no polar. Igualmente podemos resaltar la simetría entre las ecuaciones (20), (23) y (24), y las ecuaciones (28), (31) y (33) para los mecanismos de dispersión por fonones Piezoeléctricos y Ópticos Polares.

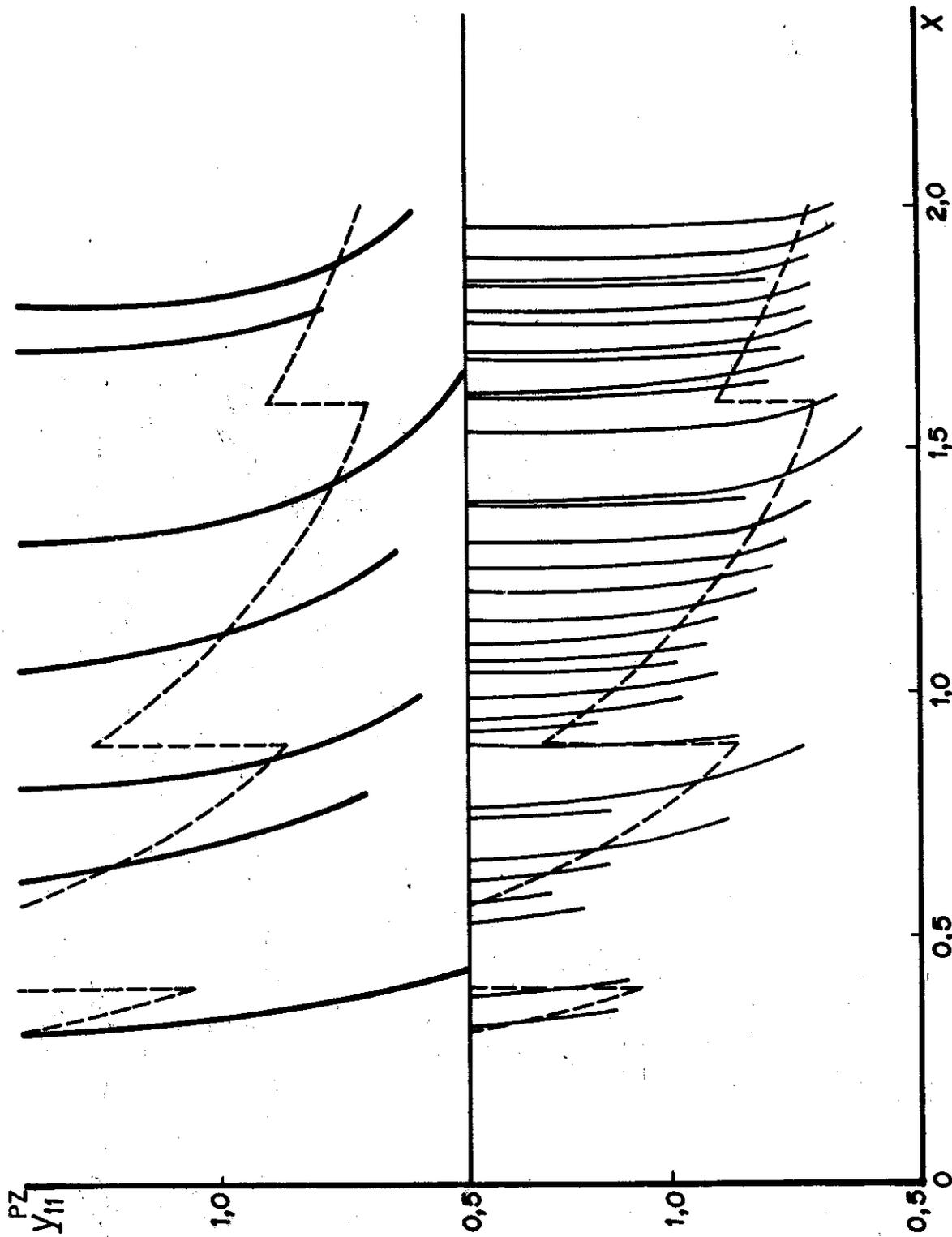


Figura 1. Tiempos de relajación relativos para dispersión por fonones, piezoeléctricos en los casos Q1D y Q2D. $Y_{11}^{PZ} = (\tau_{11}^{PZ})^{-1} / (\tau_0^{PZ})^{-1}$ vs $x = E/K_B T$ se grafica para $\alpha = 0.1$ y $\beta = 0.1$ (—) en la mitad superior, y para $\beta = 0.01$ (---) en la mitad inferior. $Y_1^{PZ} = (\tau_1^{PZ})^{-1} / (\tau_0^{PZ})^{-1}$ vs x se grafica para $\alpha = 0.1$ (---).

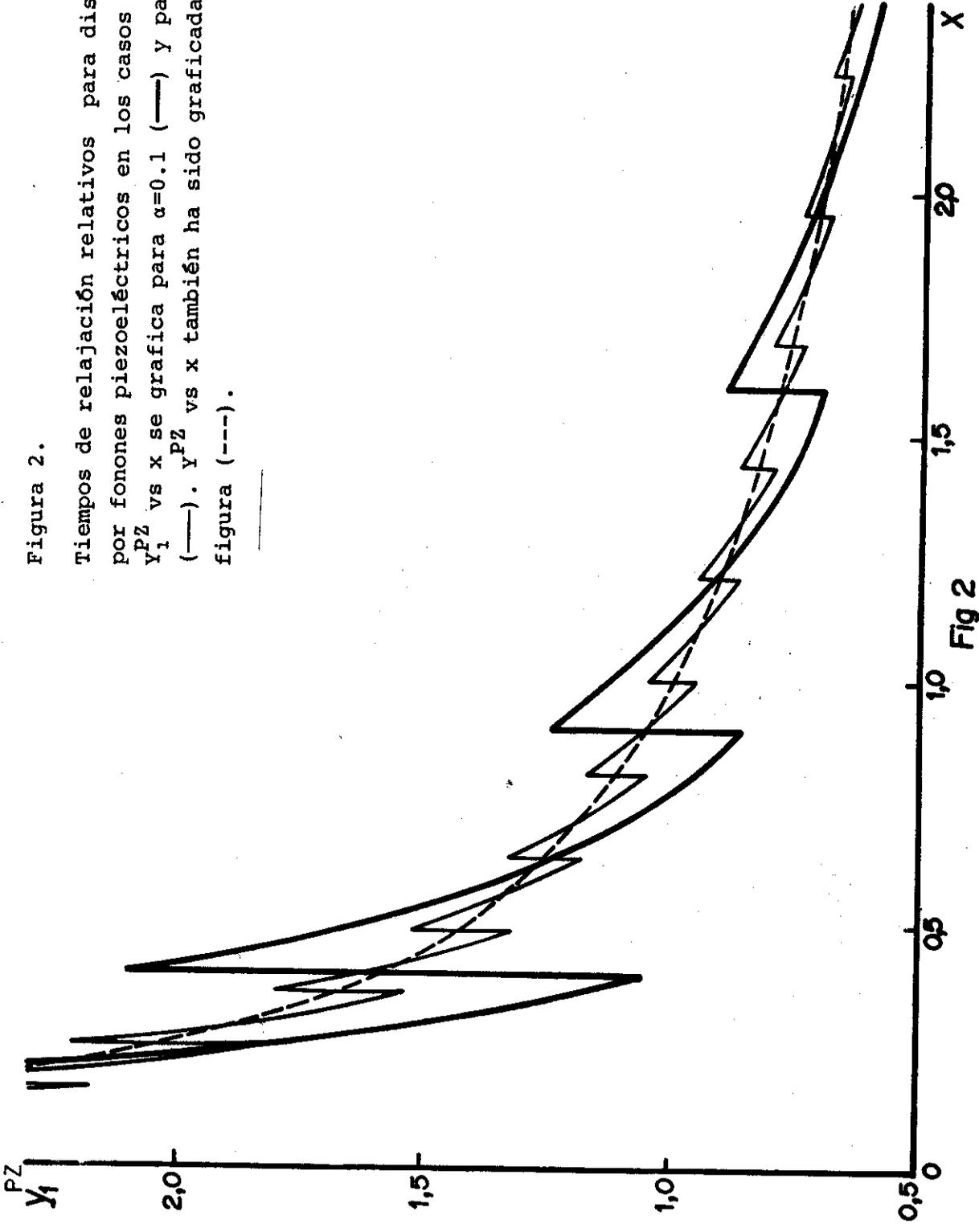


Fig 2

Figura 2.

Tiempos de relajación relativos para dispersión por fonones piezoeléctricos en los casos Q2D y 3D. Y_1^{PZ} vs x se grafica para $\alpha=0.1$ (—) y para $\alpha=0.01$ (---). Y_1^{PZ} vs x también ha sido graficada en la figura (---).

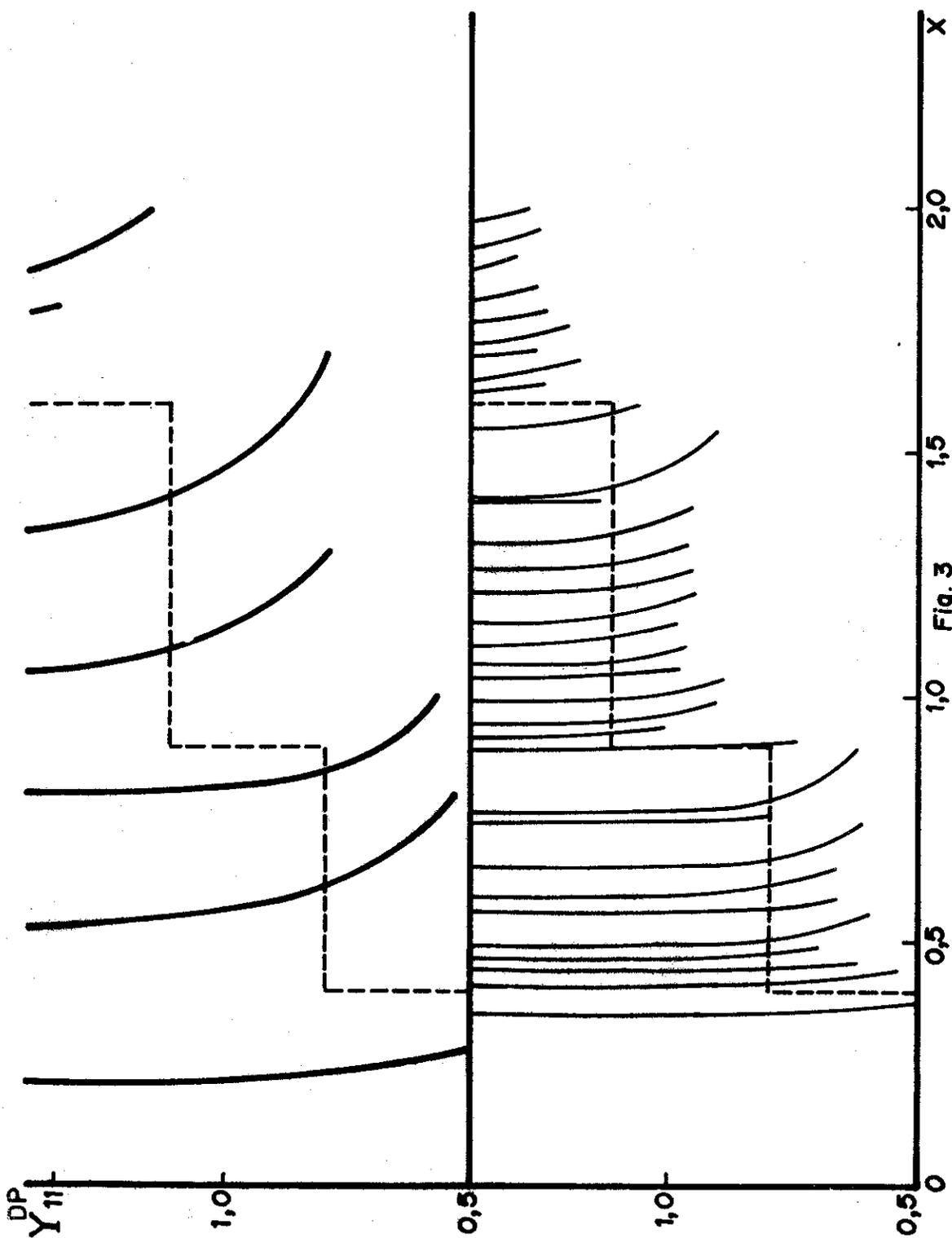


Figura 3. Tiempos de relajación relativos para dispersión por fonones acústicos en los casos Q1D y Q2D. Idem Figura 1.

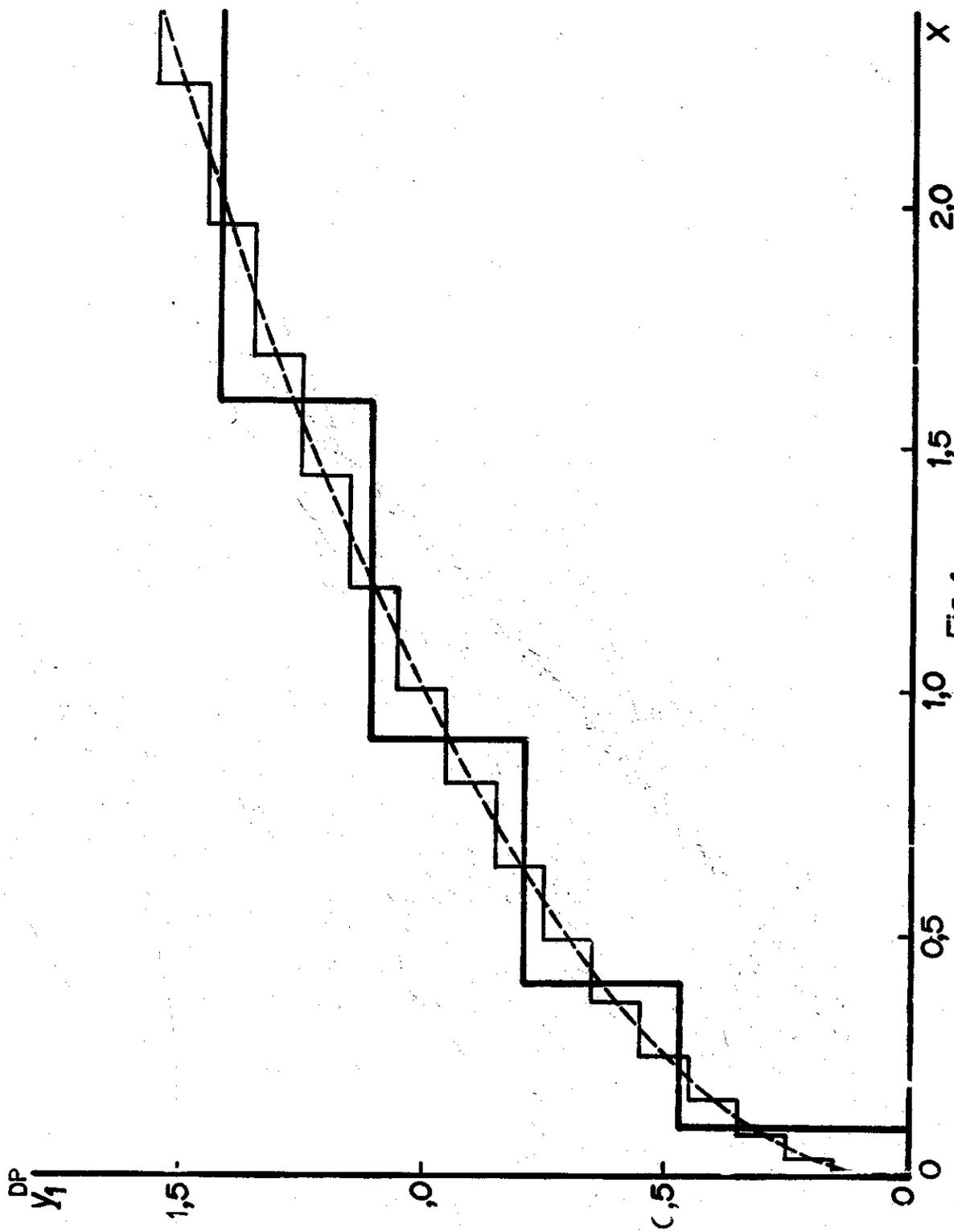


Fig.4

Figura 4. Tiempos de relajación relativos para dispersión por fonones acústicos en los casos Q2D y 3D. Idem Figura 2.

BIBLIOGRAFÍA

1. Petroff, P. M. et al. (1982). Appl. Phys. Lett. 41, 635.
2. Juang, Y.; Y. Nashimoto y P. Khattacharya (1985). J. Appl. Phys. 58, 1986.
3. Tsui, R. K. et al. (1986). Appl. Phys. Lett. 48, 940.
4. Sakaki, H. (1980). Jpn. J. Appl. Phys. 19 L735.
5. Chang, L. L. y L. Esaki (1985). Appl. Phys. Lett. 47, 1324.
6. Hirakawa, K. y H. Sakaki (1986). Phys. Rev. B 33, 8291.
7. Foxon, C. T. y J. J. Harris (1986). Phillips J. Res. 41, 313.
8. Inoue, K. y H. Sakaki (1984). Jpn. J. Appl. Phys. 23 L61.
9. Sasa, S. et al. (1985). Jpn. J. Appl. Phys. 24 L281.
10. Shah, J.; A. Pinczuk, H. L. Stormer; A. C. Gossard y W. Weigmann (1983). Appl. Phys. Lett. 42, 55.
11. Stormer, H. L. et al. (1981). Appl. Phys. Lett. 38, 691.
12. Colvard, C.; R. Fisher; T. Gant, M. Klein; R. Merlin; H. Moskoc y A. Gossard (1985). *Superlattices and Microstructures* 1, 81.
13. Arora, V. K. (1981). Phys. Stat. Sol. b 105, 707.
14. _____ (1983). Phys. Stat. Sol. b 117, 127.
15. Lee, J. y H. N. Spector (1983). J. Appl. Phys. 54, 3921.
16. Lee, J. y M. O. Vassel (1984). J. Phys. C 17, 2525.
17. Comas, F.; C. Trallero-Giner y J. Tutor (1987). Phys. Stat. Sol. b 139, 433.
18. Comas, F.; C. Trallero-Giner; H. León, y J. Tutor (1988). Physica 152, 352.
19. Basu, P. K. y N. R. Nag (1981). J. Phys. C 15, 1519.
20. Price, P. J. (1981). Ann. Phys. 133, 217.
21. Lee, J. y M. O. Vassel (1984). Jpn. J. Appl. Phys. 23, 1086.
22. Arora, V. K. y A. Naeem (1985). Phys. Rev. B 31, 3887.
23. Chattopadhyay, D. (1986). Phys. Stat. Sol. b 135, 409.
24. Nag, B. R. (1986). Pramana 27, 47.
25. Chattopadhyay, D. (1986). Phys. Rev. b 33, 7288.
26. Roy, J. B.; P. K. Basu y B. R. Nag (1981). Solid State Comm. 40, 491.
27. Ridley, B. K. (1982). J. Phys. C 15, 5899.
28. Roychoudhury, D. y P. K. Basu (1980). Phys. Rev. B 22.

29. Arora, V. K. (1983). Phys. Stat. Sol. b 115, K107.
30. Leburton, J. P. (1984). J. Appl. Phys. 56, 2850.
31. Riddoch, F. A. y B. K. Ridley (1984). Surface Sc. 142, 260.
32. Riddoch, F. A. y B. K. Ridley (1983). J. Phys. C 16, 6971.
33. Hutson, A. R. (1961). J. Appl. Phys. 32, Suppl. 2287.
34. Anselm, A. I. (1981). *Introduction to Semiconductor Theory*, Izd. Mir Moscow.
35. Bonch-Bruevich, *Introducción a la Teoría de los Semiconductores* (en ruso).
36. Chiu, L. C., et al. (1983). Jpn. J. Appl. Phys. 22, L82.

Ondas en medios viscosos compresibles

José Marín Antuña, Oscar Sotolongo Costa, Dpto. de Física Teórica.
Universidad de La Habana

RESUMEN

Los autores continúan el desarrollo de la investigación teórica de los procesos oscilatorios en fluidos viscosos compresibles comenzados en un trabajo anterior y demuestran la existencia de frecuencias límites de las oscilaciones, de ondas esféricas y cilíndricas y de ondas gravitacionales en el medio. Los resultados obtenidos generalizan la teoría existente de ondas en medios viscosos y la contemplan como un caso particular.

ABSTRACT

The authors continue the development of theoretical research of the processes of oscillation in viscose compresible fluids, wich began in a first paper and prove the existence of limit frequence for the oscilations, of spherical and cylindrical waves and of gravitational waves in the fluid. The obtained results generalize the existent theory of waves in viscose fluids and obtain it like a particular case.

INTRODUCCIÓN

En [1] fue obtenida la ecuación

$$L[u] = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial u}{\partial t} - Mv^2 u \right] - \nabla^2 u = 0 \quad (1)$$

que describe las pequeñas oscilaciones de la presión dinámica y de la concentración en un fluido viscoso compresible. Aquí $M = \frac{1}{\rho} \left[\xi \frac{4\eta}{3} \right]$ es el parámetro de viscosidad, donde η es la viscosidad newtoniana y ξ la segunda viscosidad; ρ es la densidad del fluido y c la velocidad del sonido en el medio. En el citado trabajo estudiamos las relaciones de dispersión y logramos establecer la existencia de amortiguamiento de las ondas en el medio debido a la existencia de la viscosidad. Por último, logramos establecer una dependencia funcional general entre el amortiguamiento de las ondas y la viscosidad que contiene, como casos particulares, a fórmulas obtenidas por otras vías por otros autores para viscosidades pequeñas [2] y para viscosidades grandes [3], así como una dependencia general entre el amortiguamiento y la frecuencia de las oscilaciones que reproduce con buena coincidencia los resultados experimentales.

En el presente trabajo reportamos la continuación de cálculos relacionados con la investigación teórica de los procesos oscilatorios en fluidos viscosos compresibles, la existencia de frecuencias límites para las oscilaciones, de ondas esféricas y cilíndricas y de ondas gravitacionales en el medio. Los resultados obtenidos generalizan la teoría existente de ondas en medios viscosos y la contemplan como un caso particular.

1. Frecuencias límites

Mediante el procedimiento estándar de separación de variables en la ecuación (1); es decir, proponiendo una solución del tipo $u(x,t) = v(x)T(t)$ ($x = \{x_1, x_2, x_3\}$), se obtienen para las funciones $T(t)$ y $v(x)$, respectivamente, las ecuaciones

$$T'' + \lambda M T' + \lambda c^2 T = 0, \quad \nabla^2 v + \lambda v = 0 \quad (2)$$

La solución general para $T(t)$ tiene la forma:

$$T(t) = A_1 e^{-\frac{\lambda M t}{2} + \frac{t}{2} \sqrt{\lambda^2 M^2 - 4\lambda c^2}} + A_2 e^{-\frac{\lambda M t}{2} - \frac{t}{2} \sqrt{\lambda^2 M^2 - 4\lambda c^2}} \quad (3)$$

de donde se concluye que, para la existencia de procesos oscilatorios en el medio viscoso debe cumplirse que

$$\lambda < \left[\frac{2c^2}{M} \right] \quad (4)$$

Esto significa una acotación para los autovalores que surjan del problema de Sturm-Liouville; es decir, que existen frecuencias límites para las oscilaciones en nuestro medio. Valores superiores a $\lambda_{\text{lím}} = \left[\frac{2c^2}{M} \right]$ dan procesos sobreamortiguados, no oscilatorios.

2. Ondas esféricas

Denotemos $\lambda \equiv k^2$. Entonces la parte temporal (3) de la solución adopta la forma

$$T(t) = e^{-\frac{k^2 Mt}{2}} (A_1 \cos kat + A_2 \sen kat) \quad (5)$$

donde
$$\alpha = \frac{1}{2} \sqrt{4c^2 - k^2 M^2} \quad (6)$$

Considerando la parte espacial dependiente sólo de r en R^3 , la ecuación de Helmholtz en (2) adopta la forma

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dv}{dr} \right) + k^2 v = 0 \quad (7)$$

cuya solución, como se conoce, es

$$v(r) = \frac{1}{kr} (C_1 \sen kr + C_2 \cos kr) \quad (8)$$

Por consiguiente, la solución de (1) en este caso puede expresarse como

$$u(x,t) = \frac{e^{-\frac{k^2 Mt}{2}}}{kr} D \cos(kr - kat) + \frac{e^{-\frac{k^2 Mt}{2}}}{kr} \left[A \sen kr \cos kat + B \cos kr \sen kat \right] \quad (9)$$

donde hemos redefinido las constantes independientes que, como estamos en presencia de una ecuación de tercer orden, son sólo tres. El primer sumando a la derecha de (9) tiene la forma explícita de una onda esférica divergente. El segundo sumando a la derecha de (9) puede ser transformado en una onda esférica convergente.

3. Ondas cilíndricas

Si consideramos simetría cilíndrica en la ecuación (2), para la parte espacial no es difícil obtener la solución en la forma

$$u(x,t) = u_0 e^{-\frac{k^2 Mt}{2}} e^{ikat} J_0(kR) \quad (10)$$

que, para distancias grandes es

$$u(x,t) = u_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{\left(-\frac{k^2 Mt}{2} + ika\right)t} \frac{\cos(kR - \pi/4)}{\sqrt{kR}} \quad (11)$$

de donde se ve que la amplitud disminuye como $1/\sqrt{R}$.

La onda cilíndrica se interpreta como una onda en R^3 con simetría axial, por lo que puede ser obtenida por el método del descenso de Hadamard, integrando la solución de la onda esférica. Si hacemos en la onda divergente de (9) $r^2=R^2+z^2$ e integramos respecto a z , queda:

$$\begin{aligned}
 u(x,t) &= u_0 \frac{e^{-\frac{k^2 Mt}{2}}}{k} \int_0^\infty \frac{\cos k(r-at)}{r} dz = \\
 &= u_0 \frac{e^{-\frac{k^2 Mt}{2}}}{k} \int_0^\infty \frac{\cos k(r-at)}{\sqrt{r^2 - R^2}} dz \quad (12)
 \end{aligned}$$

Si $\xi=r-at$:

$$u(x,t) = u_0 \frac{e^{-\frac{k^2 Mt}{2}}}{k} \int_{k-at}^\infty \frac{\cos k\xi d\xi}{\sqrt{(\xi + at)^2 - R^2}} - \frac{e^{-\beta t}}{at} \quad (13)$$

lo que evidencia que estamos en presencia de una onda que decrece más rápidamente que en el caso no viscoso.

4. Ondas gravitacionales

Hagamos un estudio de las ondas gravitacionales descritas por la ecuación (1) de manera similar a como esto se efectúa en la literatura conocida [2].

Aquí y en lo adelante representaremos $x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$ y Oz lo tomaremos dirigido en la dirección de la gravedad.

En la ecuación (1) consideramos que u es la presión dinámica en el fluido. Entonces, teniendo en cuenta la relación entre la presión y la condensación s:

$$p = c^2 \rho s \quad (14)$$

$$\text{y que } \vec{v} = -\vec{\nabla}\varphi \quad \text{y} \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = -\frac{\partial s}{\partial t},$$

concluimos que

$$\frac{\partial p}{\partial t} = c^2 \rho \nabla^2 \varphi \quad (15)$$

La condición de frontera impuesta por Landau [2] en la superficie del fluido para oscilaciones pequeñas es aplicable, en medida aproximada, a nuestro caso y como primera aproximación la utilizaremos. Esta es:

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} + \frac{1}{g} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \right) \Big|_{z=0} = 0 \quad (16)$$

Aquí g es la aceleración de la gravedad. Teniendo en cuenta (15), para la presión dinámica obtenemos la condición de frontera correspondiente, de manera que nuestro problema a resolver es:

$$\left\{ \begin{array}{l} L[u] = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial u}{\partial t} - M \nabla^2 u \right] - \nabla^2 u = 0 \\ \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{g} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right) \Big|_{z=0} = 0 \end{array} \right. \quad (17)$$

Sólo intentamos describir el proceso físico a lo largo del eje Oz, por eso consideraremos soluciones simétricas respecto a y:

$$u(x, y, z, t) \equiv u(x, z, t).$$

Separando variables: $u(x, z, t) = v(x, z)T(t)$, obtenemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_2^2 v + \lambda v = 0 \\ \left(T \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{g} v T'' \right) \Big|_{z=0} = 0 \end{array} \right. \quad (18)$$

donde

$$T(t) = e^{\alpha t}, \quad \text{con } \alpha = \frac{\lambda M}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{\lambda^2 M^2 - 4\lambda c^2} \quad (19)$$

$$\nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Tomemos $v(x, z) = e^{kz} f(x)$, $k = \sqrt{\lambda}$, $z < 0$. Colocando en (18) y resolviendo queda:

$$f(x) = e^{i\sqrt{2} kx} \quad (20)$$

$$v(x, z) = e^{k\langle z + i\sqrt{2} x \rangle} \quad (21)$$

Aplicamos la condición de frontera. Teniendo en cuenta la forma de las soluciones, se obtiene

$$k + \frac{1}{g} \alpha^2 = 0$$

$$\text{de donde} \quad k = -\frac{\alpha^2}{g} \quad (22)$$

La ecuación (22) es la ley de dispersión en este caso. Si $M=0$ (no hay viscosidad y el fluido es ideal), se obtiene $\alpha^2 = -\omega^2$ y (22) da:

$$k = \frac{\omega^2}{g} \quad (23)$$

que es el mismo resultado reportado en [2].

Así pues, la presión dinámica en las ondas gravitacionales que viajan de izquierda a derecha por x y de arriba hacia abajo por z es:

$$u = A e^{kz + i\sqrt{2} kx + \alpha t} \quad (24)$$

Es posible obtener la velocidad de la onda a partir de la relación de dispersión. De (22):

$$\sqrt{kg} = i\alpha = -i\frac{\lambda M}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{4\lambda c^2 - \lambda^2 M^2} \quad (25)$$

Sea

$$\omega = \sqrt{4\lambda c^2 - \lambda^2 M^2} \quad (26)$$

Entonces, colocando (26) en (25) y derivando con respecto a k , obtenemos:

$$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{g}{k}} = \frac{1}{2} \frac{dw}{dk} - i \frac{M}{2} 2k \quad (27)$$

Para $M \rightarrow 0$ (no hay viscosidad) obtenemos de (27) que la velocidad de las ondas gravitacionales es

$$\frac{dw}{dk} = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi}} \quad (28)$$

La velocidad de las ondas gravitacionales aumenta con la longitud de onda λ , resultado que coincide con el obtenido en [2].

5. Amortiguamiento de las ondas gravitacionales

El factor de amortiguamiento de la amplitud es $e^{-\gamma t}$, con:

$$\gamma = \frac{\lambda M}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\lambda^2 M^2 - 4\lambda^2 c^2} \quad (29)$$

Si $\lambda^2 M^2 > 4\lambda^2 c^2$, entonces

$$\gamma \sim \lambda M \quad (30)$$

Sea $\lambda = k_x^2 + k_z^2$, $\lambda = 2k^2$. Si suponemos que la energía de la onda se comparte en ambas direcciones, usando (23) obtenemos:

$$\gamma = \frac{2w^4 M}{g^2} \quad (31)$$

Si el fluido es incompresible, $M = \nu$ (viscosidad cinemática) y obtenemos:

$$\gamma = \frac{2w^4 \nu}{g^2} \quad (32)$$

que, de nuevo y como caso particular, coincide con los resultados dados en [2].

CONCLUSIÓN

Los resultados publicados en [1] y en el presente artículo nos permiten afirmar que hemos construido una teoría de ondas en medios viscosos compresibles que contiene, como caso particular, la teoría ya existente de ondas en medios viscosos incompresibles y en medios ideales. En futuros trabajos se continuará el desarrollo de la base físico-mate-

mática para poder acometer diferentes problemas relacionados con la excitación y propagación de ondas en estos medios.

BIBLIOGRAFÍA

1. Marín Antuña, J.; O. Sotolongo Costa. (1990). *Sobre una ecuación para oscilaciones pequeñas en un fluido viscoso compresible*. Revista Cubana de Física (aceptado para publicar).
2. Landau, L. D.; E. M. Lifshits. (1988). *Hidrodinámica*. Moscú, Nauka.
3. Brejovskij, L. M.; V. Goncharov. (1982). *Introducción a la mecánica de los medios continuos*. Moscú, Nauka.

Microfotómetro para la determinación de hemoglobina en sangre

José E. Picans Susacasa, Sonia M. López Silva, Elena M. Otazo Sánchez, Gladys Hernández Solana, Lissette Rivera Naranjo, Guillermo Santana Rodríguez, Juan Fuentes Betancourt, Elena Vigil Santos, Abelardo F. Lugrís García, IMRE - Facultad de Física - Facultad de Biología, Universidad de La Habana

RESUMEN

Han sido desarrollado un microfotómetro denominado "MF-1" y accesorios para la determinación de concentración de hemoglobina en sangre total por el método de la cianometahemoglobina. El MF-1 fue comparado con el LKB-4049 mediante la medición de muestras de pacientes simultáneamente con ambos equipos. El análisis de los datos obtenidos no mostró diferencias significativas entre ellos.

ABSTRACT

A microphotometer, "MF-1", and accessories for the determination of haemoglobin concentration in total blood by the haemoglobin cyanide method have been developed. The MF-1 was compared to the LKB-4049 by running patients samples simultaneously on both instruments. The analysis of data obtained showed no significant differences between them.

INTRODUCCIÓN

El desarrollo de la química clínica y de la microelectrónica ha permitido diseñar sistemas sencillos, portátiles y relativamente económicos para la determinación de diversos componentes en el laboratorio clínico. Entre estos componentes, ocupa un lugar importante la concentración de hemoglobina.

Recientemente hemos desarrollado un microfotómetro para la determinación de la concentración de hemoglobina. Este equipo, denominado en su primera versión MF-1, se caracteriza por la rapidez con que efectúa la medición, su fácil manejo y transportación, y su bajo consumo tanto energético como de reactivos. Tales particularidades conllevan a que el mismo pueda utilizarse en condiciones diversas, en el domicilio de un enfermo, en la consulta del médico de la familia, en zonas rurales, o en cualquier otro sitio de atención primaria del sistema nacional de salud.

DESARROLLO

El microfotómetro MF-1 está diseñado para realizar la determinación fotométrica de la concentración de hemoglobina en un intervalo de valores comprendidos entre 50 y 200 g/L, (5.0 y 20.0 g/dL) empleando el método de la cianometahemoglobina según lo recomendado nacional e internacionalmente /1,2,3/.

En una disolución preparada convenientemente se cumple la ley de Bouguer-Lambert-Beer, por tal razón la concentración de hemoglobina [Hb] puede ser calculada como:

$$[Hb] = A \cdot Fp$$

donde A es la absorbancia de la disolución de cianometahemoglobina CNHb y Fp es el factor de calibración del equipo de medición /3/.

La absorbancia de la muestra es el logaritmo del inverso de la transmitancia:

$$A = \log \frac{I_0}{I_s}$$

donde I_0 es la intensidad luminosa transmitida por la disolución de ciano-ferricianuro de potasio (CNFe), I_s es la intensidad luminosa correspondiente a la disolución anterior con sangre.

En nuestro sistema de medición se utilizan ampulas de vidrio de producción nacional que contienen 2,5 mL de disolución de CNFe. Para efectuar la determinación, se añaden 10 μ L de sangre, la cual se toma con ayuda de un microcapilar desechable y se agrega al reactivo de CNFe con un dispositivo diseñado para tal fin.

El equipo MF-1 es un microfotómetro de un solo rayo con filtro. Consta de dos partes fundamentales: una óptica y una electrónica (Figura 1). El funcionamiento del equipo es controlado por un microprocesador. A través de señales sonoras y la información que aparece en el display se le indica al operador cuando debe colocar el ampula con el reactivo, quitarla para añadir la sangre y colocarla nuevamente. Finalmente, en el display del equipo se presenta el valor de la concentración de Hb.

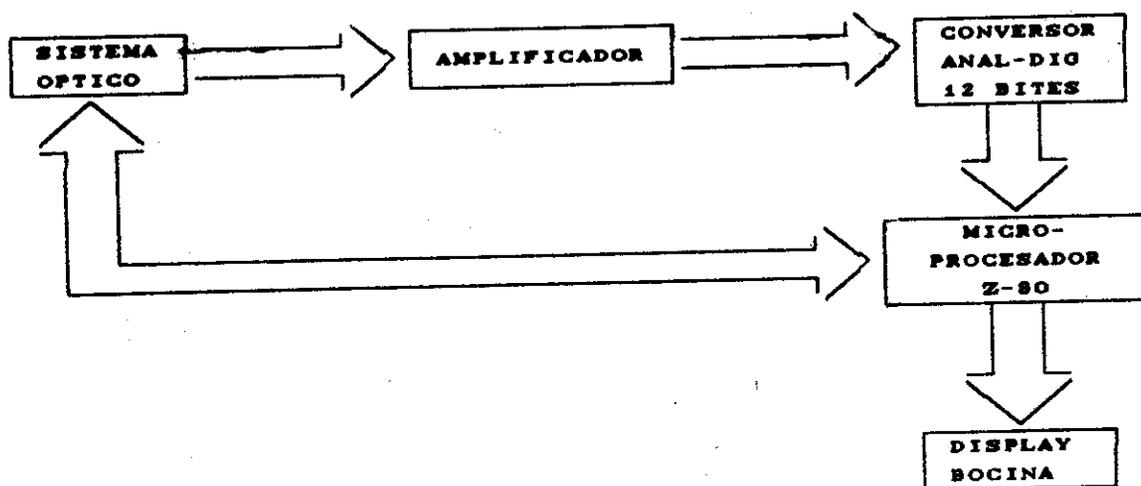


Figura 1. Esquema del funcionamiento del microfotómetro MF-1.

El sistema óptico diseñado (Figura 2) consta de una lámpara de filamento de tungsteno (1), una lente (2) que concentra el haz luminoso sobre el ampula (3), un filtro (4) con máxima transmitancia a 530 nm y ancho de 40 nm, y un fotodiodo de silicio (5). La señal eléctrica prove-

niente del fotodiodo es amplificada por un amplificador transconductor y llevada a código binario por un conversor analógico-digital de 12 bits (Figura 1). Después de sensar los valores de I_0 e I_s , el microprocesador calcula el cociente de ellos y busca en una tabla el valor de [Hb] correspondiente.

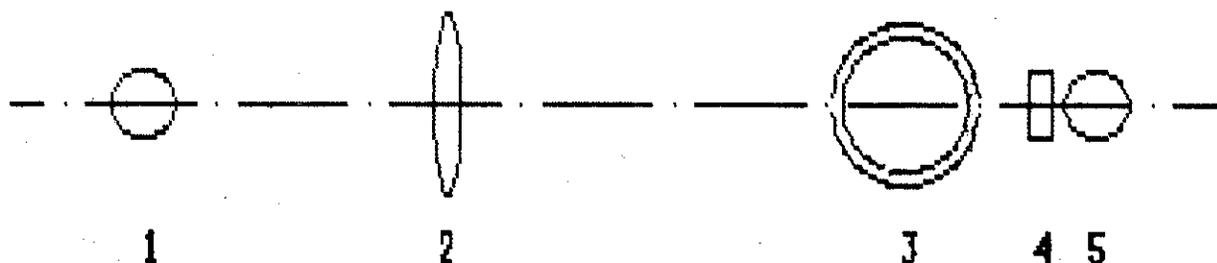


Figura 2. Esquema del sistema óptico del microfotómetro MF-1.

1. lámpara de filamento de tungsteno
2. lente
3. ampolla
4. filtro 530 nm
5. fotodiodo de silicio

La tabla de calibración del equipo se confeccionó de acuerdo con lo recomendado en /2/. Se prepararon seis disoluciones patrones de CNHb de concentración conocida utilizando el reactivo de CNFe, ampollas de patrones de cianometahemoglobina de la firma BDH y del preparado en la Empresa de Productos Farmacéuticos de Cuba. El modo de preparación de cada una se indica en la Tabla 1. Se utilizaron microburetas con una precisión de 0,05 mL. A cada ampolla se le midió cinco veces el inverso de la transmitancia en el MF-1. Con estos resultados se calculó F_p y se confeccionó la tabla de calibración. Una vez programada esta en la memoria, el equipo se comprobó midiendo [Hb] de las ampollas con patrones y comparando estos valores con los de la Tabla 1.

Tabla 1. Preparación de patrones de CNHb para la calibración

Firma del Patrón	Vol. Patrón	Vol. CNFe (mL)	[CNHb] (g/L)	Cantidad de Ampulas
BDH	2,5	0	144	3
BDH	2,0	0,5	115	3
BDH	1,5	1,0	86	3
BDH	1,0	1,5	57	3
cubano	2,5		173	3
-	0	2,5	0	3

Con el objetivo de verificar el funcionamiento del equipo en condiciones concretas de trabajo, se efectuó una prueba preliminar en el Centro de Referencia (CENREF) del Laboratorio Clínico del Hospital Clínico-Quirúrgico Hermanos Ameijeiras. La prueba consistió en determinar [Hb] en muestras de sangre de pacientes del hospital, con un prototipo del MF-1 y con el espectrofotómetro comercial LKB (modelo 4049).

La determinación en el LKB se efectuó con el instrumental y de acuerdo con la norma establecida nacionalmente: 20 μ L de sangre en 5 mL de disolución de CNFe, medido en cubetas de 1 cm de paso de luz a 540 nm. Con el MF-1 se trabajó según lo descrito anteriormente y para recoger la muestra de sangre se utilizaron micropipetas capilares desechables de la firma Dr. Lange.

Durante tres días de trabajo se analizaron 145 muestras que abarcaron el intervalo de interés clínico. Cada día, al comienzo y al final de la jornada, se comprobó el funcionamiento del MF-1 midiendo la concentración de cianometahemoglobina [CNHb] en ampulas patrones de 144 g/L de la firma BDH. Una muestra de 2.5 mL del contenido del ampula patrón abierta cada día, se utilizó para la determinación del factor de conversión de la absorbancia medida con el LKB a unidades de [Hb].

En la Tabla 2 se muestran los resultados de la determinación experimental con el MF-1 de la concentración del patrón BDH durante los tres días de trabajo. Aparecen reflejados la concentración del patrón [CNHb], la cantidad de mediciones efectuadas n, el valor medio de concentración obtenido [CNHb]_m, la desviación estándar D.S. y el coeficiente de variación C.V.

Tabla 2. Resultados de la medición del patrón con el MF-1

[CNHb] (g/L)	n	[CNHb] _m (g/L)	D.S. (g/L)	C. V. (%)
144	6	143.5	.8	.6

En la Tabla 3 se comparan los resultados de las mediciones efectuadas con ambos equipos, cada uno de los tres días y los tres días en total: el valor medio [Hb]_m, la desviación estándar de este valor medio D.S. y el intervalo de variación de los valores de [Hb] obtenidos. Se incluyen, además, la diferencia media entre los resultados obtenidos con el LKB y con el MF-1 y la desviación estándar de esta diferencia media D.S.. El tratamiento de los resultados diarios y total por el test t de observaciones pareadas no mostró diferencias significativas entre las mediciones con ambos equipos.

Los parámetros pendiente, intercepto y error o desviación estándar sobre la línea de regresión dsY/X pueden proveer la mejor información sobre los errores entre los dos equipos si no se obvian las limitaciones causadas por la no linealidad, la presencia de datos espurios y un intervalo de valores experimentales pequeño /4/. En la Figura 3 se representan gráficamente los resultados del análisis de regresión lineal por mínimos cuadrados de los 145 pares de determinaciones de [Hb].

Tabla 3. Comparación de los resultados en el MF-1 y el LKB.

Día	Equipo	n	[Hb]m	D.S.	Rango (g/L)	Dif. med.	D.S.	Test t
I	MF-1	58	137.3	17.3	76-166			
	LKB	58	137.6	18.3	74-167	-.3	5.8	n.s.
II	MF-1	38	119.3	25.5	66-167			
	LKB	38	117.9	24.4	68-161	1.4	4.6	n.s.
III	MF-1	49	117.2	29.2	67-185			
	LKB	49	116.4	27.3	72-173	.8	4.2	n.s.
total	MF-1	145	125.8	25.9	66-185			
	LKB	145	125.3	24.9	68-173	.5	5.0	n.s.

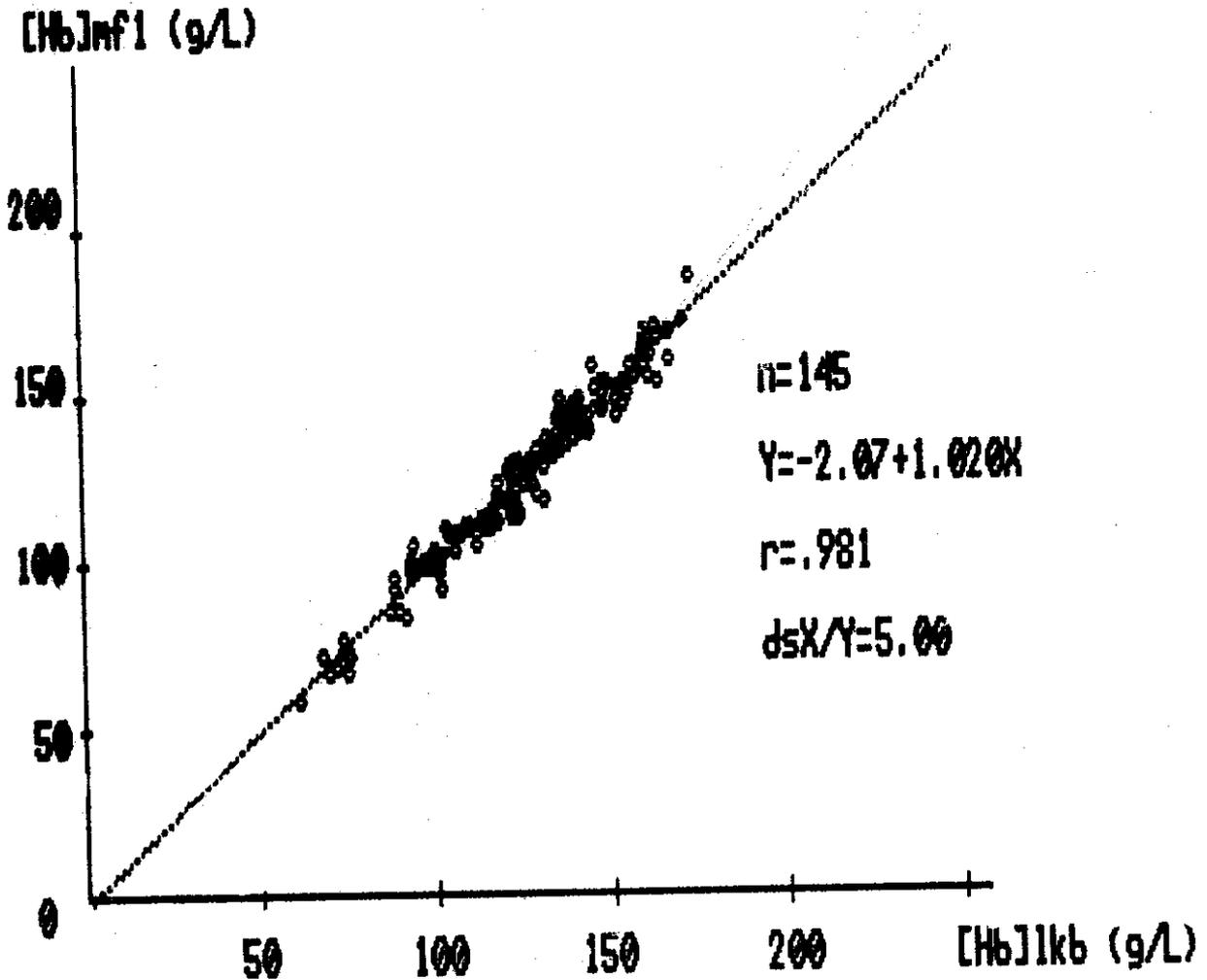


Figura 3. Análisis de regresión lineal por mínimos cuadrados de las determinaciones de [Hb] con los equipos MF-1 y LKB en tres días de trabajo.

Las diferencias entre los resultados obtenidos con el LKB y con el MF-1 pueden ser cuantificadas por medio de un gráfico. En la Figura 4 se muestra la extensión de estas diferencias a través de un histograma, donde F.R. es la frecuencia relativa en % y $[Hb]_{mf1} - [Hb]_{lkb}$ es la diferencia entre el valor de concentración obtenido con el MF-1 y el obtenido con el LKB.

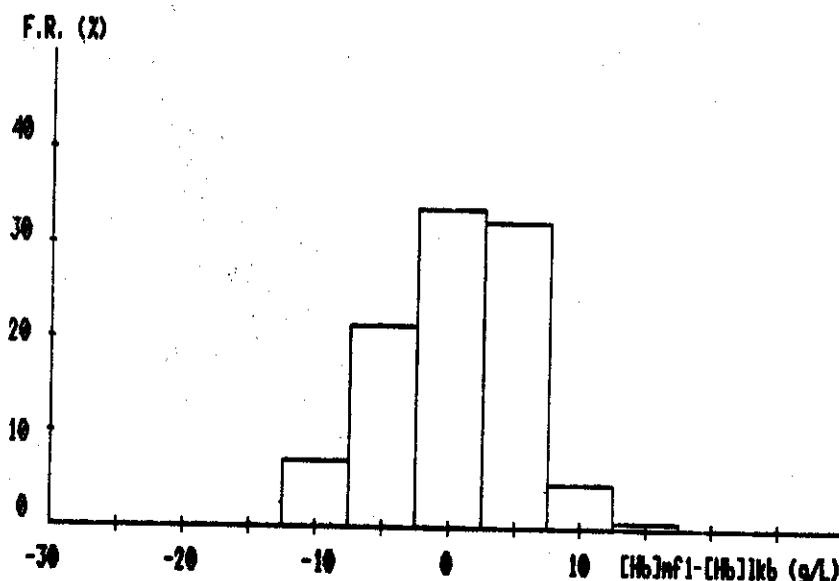


Figura 4. Histograma de las diferencias en tres días de trabajo entre las determinaciones de $[Hb]$ con los equipos MF-1 y LKB.

A pesar de que la cantidad de mediciones efectuadas en patrones BDH no es alta, no deja de tener valor la información que nos suministra la Tabla 2. Obsérvese que los resultados son prácticamente similares con un coeficiente de variación de sólo 0.6 %.

El valor del error o desviación estándar sobre la línea de regresión de la Figura 3 coincide perfectamente con el valor de la desviación estándar de la diferencia media entre los resultados obtenidos con el LKB y con el MF-1 (Tabla 3) y ambos indican un error aleatorio de 5 g/L. La pendiente de la recta de mejor ajuste es 1.020, lo cual brinda un estimado de 2 % de error proporcional. El intercepto en Y sugiere un error constante de la determinación en el MF-1 con respecto al LKB de -2.07 g/L. Sin embargo, este valor no coincide con el de .5 g/L obte-

nido a través de la diferencia media (Tabla 3). Este último valor es relativamente pequeño y la no coincidencia de ambos puede explicarse por el hecho de que el parámetro diferencia media depende igualmente del error proporcional. El coeficiente de correlación es .981. La inspección visual del gráfico de la Figura 3 permite corroborar la linealidad y la ausencia de datos espurios en la distribución de los puntos experimentales.

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Del análisis efectuado a los resultados de la prueba en el CENREF mediante el test t de observaciones pareadas y la regresión lineal por mínimos cuadrados, así como de la apreciación de lo mostrado gráficamente se concluye que el microfotómetro MF-1 permite obtener valores de concentración de hemoglobina que no difieren significativamente de los obtenidos con un espectrofotómetro LKB, de acuerdo con lo normado nacionalmente.

El microfotómetro IMRE modelo MF-1 está siendo evaluado por una comisión del MINSAP con vistas a su posterior producción nacional. Dos prototipos se comprobaron durante varios meses en el Laboratorio del Policlínico Plaza de la Revolución y en un consultorio del médico de la Familia en Alamar con resultados satisfactorios.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a los compañeros del Hospital Clínico-Quirúrgico Hermanos Ameijeiras Dr. Celso Cruz, técnico Marlen Fraga Casas y Lic. Ana M. Arias Prieto, la colaboración prestada durante la realización de la prueba del microfotómetro MF-1. Agradecemos especialmente al Dr. Francisco Baldor Navarro la ayuda brindada antes y durante la prueba, así como las valiosas recomendaciones y observaciones realizadas al presente trabajo.

BIBLIOGRAFÍA

1. *International Committee for Standardization in Haematology* (1978). Recommendations for reference method for haemoglobinometry in human blood (ICSH Standard EP 6/2:1977) and specifications for international haemoglobin cyanide reference preparation (ICSH Standard EP 6/3:1977). *J. Clin. Path.* 31, p. 139.
2. Van Assedelft, O. W. et al. *Recommended method for the determination of the haemoglobin concentration in blood*. LAB 84/10.
3. NC 57-98-1; 86 SNNMCC. *Determinación fotométrica de hemoglobina en sangre*. Método de análisis clínico.
4. Westgard, J. O.; M. R. Hunt (1973). *Use and interpretation of common statistical test in method comparison studies*. *Clin.Chem.* 19, p. 49
5. Westgard, J. O. et al. (1978). *Concepts and practices in the evaluation of laboratory methods. II. Experimental procedures*. *Am. J. Med. Technol.* 44, p. 420.
6. Westgard, J. O. et al. (1978). *Concepts and practices in the evaluation of laboratory methods. III. Statistics*. *Am. J. Med. Technol.* 44, p. 552.
7. James, G. P.; D. E. Bee (1981). *Evaluation of clinical laboratory instruments. Part II: Use and abuse of statistical tools*. *Am. J. Med. Technol.* 47, p. 303.
- 8- Willard, H. W.; L. L. Merritt; J. A. Dean (1964). *Instrumental methods of analysis*. Ed. D. Van Nostrand. Toronto. New York and London.
9. Henry, R. J.; D. C. Cannon; J. W. Winkelman (1980). *Química clínica. Bases y técnicas*. Ed. Jims. Barcelona.