

REDUCCION DE LA CONCENTRACION DE ELECTRONES EN InGaAs CECIDO POR LPE POR ADICION DE TIERRAS RARAS AL FUNDIDO

A. Iribarren, IMRE, Universidad de La Habana.
V.G. Gruzlov, A.T. Gorelenok, I.F.T. A.F. Ioffe, Leningrado.

RESUMEN

Se presenta la reducción de la concentración de electrones en capas de InGaAs crecidas por epitaxia desde la fase líquida (LPE) con adición de tierras raras en el fundido de crecimiento y cortos tiempos de precalentamiento. Se obtiene la expresión matemática que se ajusta al comportamiento de los puntos experimentales.

ABSTRACT

The electron concentration reduction in LPE grown InGaAs layers with rare-earth addition in the growth melts and short baking times is presented. An expression which adjusts to the data behaviour is obtained.

INTRODUCCIÓN

Las soluciones sólidas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ acopladas reticularmente con el InP son materiales imprescindibles para la obtención de dispositivos optoelectrónicos que trabajan en el rango de longitudes de onda entre 0,95 y 1,67 μm . Las estructuras de ellas obtenidas requieren, para la fabricación de fotodiodos, capas que posean alta pureza, o sea, bajas concentraciones de impurezas que redundan en zona de carga espacial ancha,

capacidades bajas y bajo ruido, lo que es significativamente importante en los fotodiodos de avalancha (APD) [1], de manera que en régimen de trabajo, el dispositivo tenga ruptura de avalancha y no Zener. Para que esto ocurra, se requiere que la concentración de impurezas donoras sea menor que $6 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ en el $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$, que $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ en el InP y con valores intermedios entre los señalados según la composición del $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ [2]. Para disminuir la concentración de impurezas en las capas epitaxiales de estos compuestos, que normalmente es de alrededor de 10^{17} cm^{-3} , se ha utilizado además de materiales de partida de alta pureza y un entorno de trabajo limpio, el precalentamiento de los fundidos durante períodos de tiempo del orden de decenas de horas [3, 4, 5]. Otro método también empleado para ello es la adición de tierras raras en los fundidos [6].

En el presente trabajo se muestran resultados obtenidos en la reducción de la concentración de impurezas en capas de InGaAs por adición al fundido de crecimiento de tierras raras como Ho, Gd y Dy.

TÉCNICA EXPERIMENTAL

Se utilizó la técnica convencional de LPE para el crecimiento de las capas de compuestos del sistema In-Ga-As-P. Los crecimientos se realizaron en un bote de corredera de grafito manipulado con varillas de molibdeno dentro de un reactor de cuarzo por el que pasa hidrógeno puro. El reactor se encuentra dentro de un horno controlado que posee una zona isotérmica, de manera que a lo largo del bote la temperatura sea la misma. Para el crecimiento se sitúa en el bote un fundido de In solo, cuya función es eliminar las capas del sustrato dañadas por el calentamiento, luego un fundido de In+InP para la capa buffer y a continuación el fundido del ternario de In+InAs+GaAs.

Previo a los crecimientos se prepararon y homogenizaron los fundidos mediante su calentamiento a temperatura algo superior a la del proceso. En este precalentamiento que fue de dos horas se excluye el fundido de In solo [5] y no se coloca el sustrato. A los fundidos sólo se les agregó como impureza la tierra rara.

Los sustratos fueron de InP tipo n con orientación (100).

EMPLEO DE LAS TIERRAS RARAS Y RESULTADOS

El empleo de las tierras raras como impurezas en los fundidos para reducir la concentración residual de donores en las capas crecidas se ha reportado en compuestos III-V del sistema In-Ga-As-P [6]. Este fenómeno se explica por el hecho que las tierras raras forman compuestos químicos con los elementos del grupo VI en el fundido, evitando la captura de

estos compuestos por la fase sólida [7, 8, 9]. En este trabajo se presenta el crecimiento de capas de InGaAs a partir de fundidos con adición de Ho, Gd y Dy. Los tiempos de precalentamiento de los fundidos fueron de 2 h. Las mediciones de concentración de portadores se realizaron por el método de C-V con punta de Hg, escogiendo las capas con buena morfología superficial. En la Figura 1 se muestran los resultados obtenidos en capas de InGaAs crecidas a partir de fundidos con adición de Ho. Es de notar que gráficamente se aprecia la tendencia a disminuir la concentración de portadores con el aumento de la cantidad de Ho. Asumiendo una expresión exponencial, por el método de mínimos cuadrados se obtiene:

$$n = 1,15 \cdot 10^{17} \cdot \exp [-7724 \cdot X^L] \quad (1)$$

donde X^L es la concentración de Ho en el fundido en fracciones atómicas y n la concentración de electrones en cm^{-3} .

En la Figura 2 se agregan a los datos correspondientes a la adición de Ho, los de Gd y Dy, observándose que los puntos están en el entorno de los primeros, aunque al aplicar mínimos cuadrados a todo el grupo de valores, la expresión queda:

$$n = 8,9 \cdot 10^{16} \cdot \exp [-7665 \cdot X^L] \quad (2)$$

De los gráficos y las condiciones del proceso se infiere que con cortos períodos de precalentamiento y el empleo de cantidades adecuadas de tierras raras en los fundidos puede reducirse la concentración de portadores hasta en dos órdenes, o sea, $n \sim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ para $X^L \sim 0,05$ % de Gd en el fundido. La cantidad de tierra rara se asume que no afecta la capa crecida, pues no se incorpora a ella, sino que sólo actúa sobre el fundido, formando compuestos químicos con las impurezas residuales del grupo VI, especialmente con el S [9], de ahí que puedan obtenerse capas puras de InGaAs sin necesidad de largos precalentamientos [3, 4, 5].

CONCLUSIONES

Se crecieron capas de InGaAs agregando tierras raras a los fundidos, lo que condujo a una reducción significativa de la concentración de electrones de hasta dos órdenes. La obtención de tales resultados indica que no son necesarios largos precalentamientos si se agregan cantidades adecuadas de tierras raras a los fundidos.

REFERENCIAS

1. FORREST, S.R. (1981): IEEE J. Quantum Electron, QE-17, 217.
2. TAKANASHI, Y. et al. (1980): Japan J. Appl Phys., 9, 693.
3. COOK, L.W. et al. (1982): J. Cryst. Growth, 56, 475.
4. PEARSALL, T.P. (1980): IEEE J. Quantum Electron, QE-16, 709.

5. CHAND, N. et al. (1981): Electron. Letters, 17, 726.
6. BAGRAEV, N.T. et al. (1984): Fiz.i Tejn. Poluprovodn, 18, 83.
7. BESPALOV, V.A. et al. (1987): Sd. Kratk. Soobshch. Fiz. A.N. SSSR, Fiz. Inst. P.N. Lebedeva, 9, 32.
8. KORBER, W. et al. (1986): J. Cryst. Growth, 79 (1-3), pt. 2, 741.
9. GORELENOK, A.T. et al. (1988): Fiz.i Tejn. Poluprovodn, 22, 35.

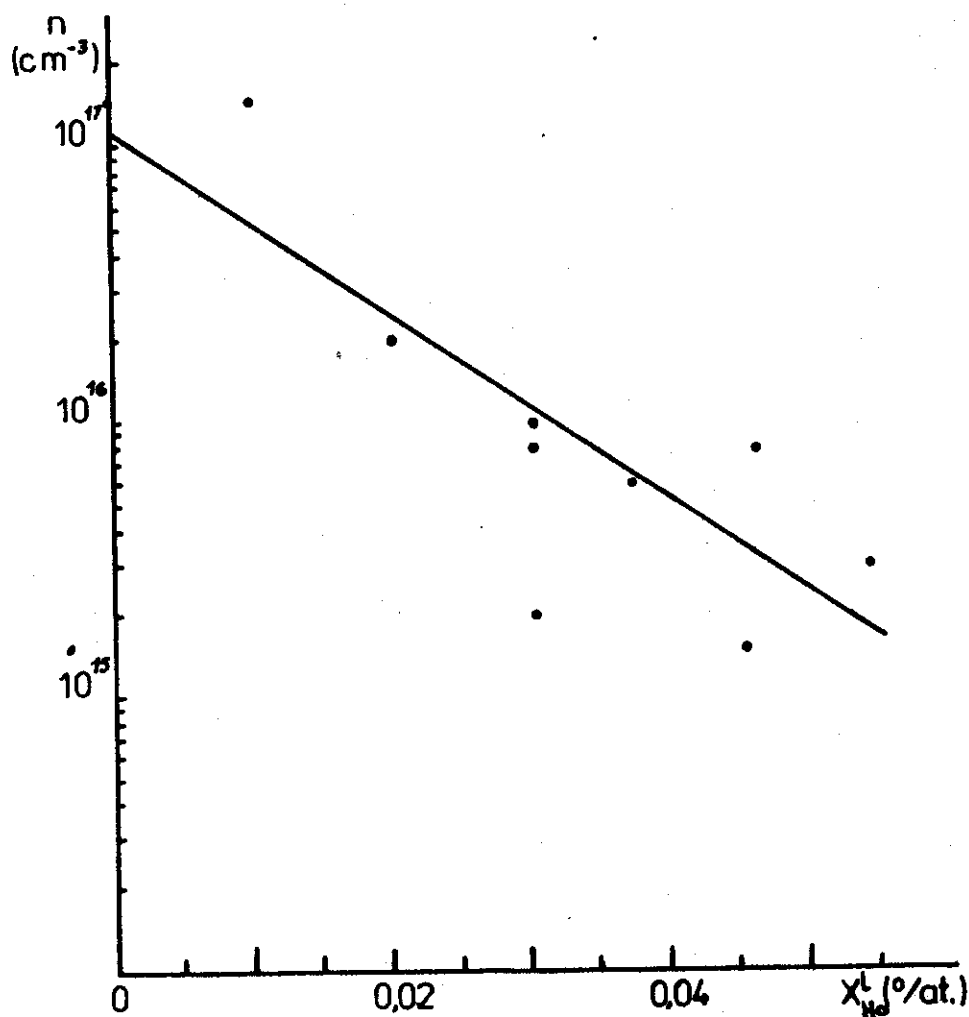


Figura 1. Dependencia de la concentración de portadores en capas de InGaAs con la concentración de Ho en el fundido.

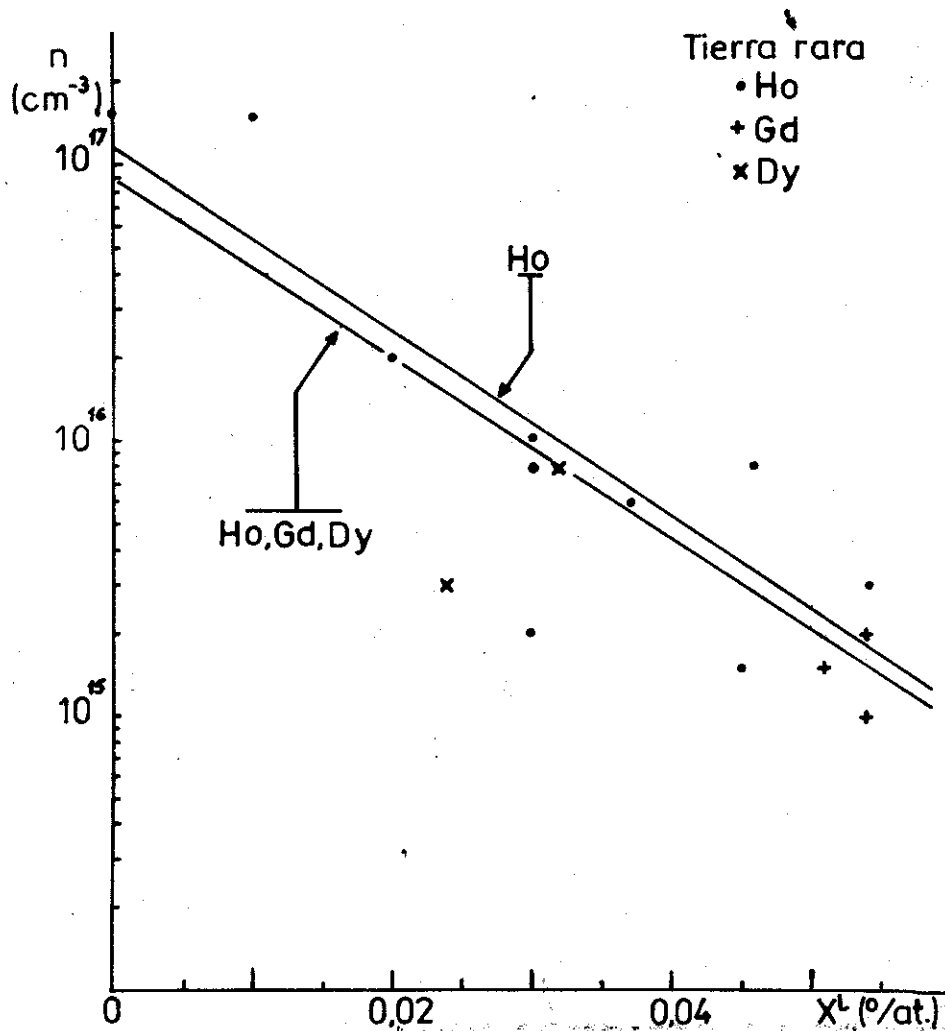


Figura 2. Dependencia de la concentración de portadores en capas de InGaAs con la concentración de tierras raras (Ho, Gd y Dy) en el fundido.

INFLUENCIA DE LA TEMPERATURA EN LAS CARACTERÍSTICAS VOLT-AMPERICAS DE FOTODETECTORES DE SILICIO

Marcia García A., Manuel Iglesias P. y Sara Aguilera M., IMRE-Facultad de Física, Universidad de La Habana.

RESUMEN

En este trabajo se describe el montaje de una técnica experimental que brinda la posibilidad de medir las características volt-ampéricas a diferentes temperaturas de los dispositivos que se fabrican en el laboratorio de Celdas Solares de Silicio del IMRE, en la Universidad de La Habana. Se analizan los resultados obtenidos a través de los cuales es posible identificar los mecanismos límites de recombinación, generación y transporte de portadores que existen en estos dispositivos de silicio.

ABSTRACT

An experimental technique to determinate the volt-amperical characteristics at different temperatures is described in this paper. Using this technique the I-V characteristics of photodevices produced at the "Silicon Solar Cells Laboratory" in IMRE at Havana University were measured. By analysing the results we identify the recombination, the generation and the transport mechanisms of carriers acting in these silicon photodevices.

INTRODUCCIÓN

1. Efectos de la temperatura en las características de salida de un fotosensor.

Debido a que la temperatura de trabajo de un fotosensor puede variar sustancialmente, es necesario conocer y analizar los efectos que causa la temperatura en su funcionamiento.

Las características I-V oscuras e iluminadas con la temperatura como parámetro permiten identificar los mecanismos límites de recombinación en el semiconductor, así como los de generación y transporte de portadores en este.

Los primeros estudios de los efectos de la temperatura en las características de salida y en los parámetros internos de estos dispositivos fueron hechos por Wysocky y Rappaport [1]. Otros autores han continuado estas investigaciones [2-10]; pero los resultados de las mismas y de otras realizadas a posteriori no han llevado a conclusiones muy consistentes.

Sin embargo, se ha podido verificar una tendencia general en la variación de los valores de algunos parámetros de los fotosensores (como la I_{cc} y el V_{ca} , entre otros), ante los incrementos y descensos de temperatura.

1.a EFECTOS DE LA TEMPERATURA SOBRE LOS PARÁMETROS DEL SEMICONDUCTOR.

Los parámetros del semiconductor que determinan el comportamiento de un fotodetector como función de la temperatura son: la concentración intrínseca de portadores (n_i), la longitud de difusión (L_D) que depende del tiempo de vida (τ) y de la movilidad (μ), y el coeficiente de absorción (α) que tiene una relación directa con el ancho de la banda de energía prohibida (E_g).

La concentración intrínseca de portadores juega un papel importante en la determinación del voltaje a circuito abierto (V_{ca}), el cual decrece fuertemente con el aumento de la temperatura, ya que n_i crece de la misma forma [2].

La movilidad de los portadores en la base del semiconductor decrece algo con el incremento de temperatura. En el silicio, el tiempo de vida generalmente se incrementa en algunos órdenes con el incremento de la temperatura, tanto para material tipo n como para material tipo p. Estas variaciones en los valores de la movilidad y en el tiempo de vida, en el caso del silicio, conducen a un aumento de la longitud de difusión con el aumento de la temperatura [2].

El coeficiente de absorción del silicio aumenta con el incremento de la temperatura, es decir, sufre un corrimiento hacia las bajas energías [2, 3, 11].

1.6 EFECTOS DE LA TEMPERATURA SOBRE LOS PARÁMETROS DEL DISPOSITIVO.

La corriente de cortocircuito (I_{cc}) se incrementa muy ligeramente con el incremento de temperatura, por una parte debido al aumento de la longitud de difusión y por otra, debido al aumento del coeficiente de absorción como consecuencia de la disminución del valor del ancho de la banda prohibida [2, 3, 11].

El voltaje a circuito abierto (V_{ca}) en los fotosensores de silicio decrece muy fuertemente de forma casi lineal con el aumento de la temperatura. Este decrecimiento se debe al fuerte incremento de la corriente oscura con la temperatura, a la disminución de la resistencia paralelo y a los efectos de recombinación de portadores [2]. Se ha encontrado una razón de decrecimiento de aproximadamente $-2,5 \text{ mV}/^{\circ}\text{C}$ para fotosensores de silicio con resistividad en la base de $\rho = 10 \text{ } \Omega\text{-cm}$ y de $2,2 \text{ mV}/^{\circ}\text{C}$ para los de $\rho = 2 \text{ } \Omega\text{-cm}$.

La corriente oscura (I_o) generalmente está compuesta por la corriente de inyección (I_{iny}), la corriente de recombinación en la región de empobrecimiento (I_r) y en algunos dispositivos, por la corriente de tunelaje (I_{tun}).

Para dispositivos de silicio con resistividad en la base entre $1\text{-}10 \text{ } \Omega\text{-cm}$, el valor de la densidad de corriente de inyección extrapolada a $V = 0\text{V}$ es aproximadamente de 10^{-12} A/cm^2 ; mientras que el valor de la densidad de corriente de la recombinación-generación es aproximadamente de 10^{-8} A/cm^2 . Al mismo tiempo, la corriente de inyección varía con la temperatura siguiendo la dependencia $e^{qV/kt}$, mientras que la corriente de recombinación varía con la temperatura según $e^{qV/2kT}$, por lo que las primeras dominan para altos voltajes de polarización y las segundas para bajos voltajes de polarización. La corriente de tunelaje, sin embargo, es muy independiente de la temperatura.

Precisamente del análisis de las características I-V bajo polarización directa, donde la temperatura, T , es el parámetro, se pueden identificar los mecanismos de corriente dominantes para los diferentes rangos de voltaje y corriente. Para el silicio, la dependencia de la corriente oscura, I_o , y de los factores de corrección, A_i , con la temperatura, T , son conocidos para cada mecanismo [4], como muestra de la Tabla 1.

Los mecanismos 1, 2 y 5 pueden ocurrir en diodos de juntura, Schottky, M.I.S. y S.I.S.

Los mecanismos 3 y 4 ocurren generalmente en dispositivos con barrera en la superficie, como los Schottky, M.I.S. y S.I.S.

El mecanismo 1 puede identificarse fácilmente porque, además de que $A_2 = 1$ en la rama difusiva a temperatura ambiente, el gráfico $\ln(I_{O2})$ Vs $1/T$ es lineal.

El mecanismo 2 puede identificarse porque, además de ser $A_1 = 2$ en la rama recombinativa a temperatura ambiente, el gráfico $\ln(I_{O1})$ Vs $1/T$ es lineal.

El mecanismo 5 se identifica porque la dependencia del $\ln(I_{O2})$ con la temperatura T es lineal y $A_2 T = \text{cte}$ para cada temperatura; además de que, a partir de la rama recombinativa, las curvas $\ln(I)$ Vs V a diferentes temperaturas son casi paralelas.

Los mecanismos 3 y 4 ocurren en los diodos Schottky o M.I.S. y se identifican porque el gráfico $\ln(I_{O2})$ Vs $1/T$ es lineal.

Todos los mecanismos que se presentan en la Tabla 1 ocurren simultáneamente y en dependencia de la polarización y del dispositivo analizado, predominará uno o a lo sumo dos de ellos.

Además de los mecanismos clásicos de generación interna de corriente tabulados, pueden estar presentes otros mecanismos en los fotosensores. Ellos son la recombinación Auger (en materiales altamente dopados), transporte a través de las fronteras de granos (en materiales policristalinos) y fugas de corrientes en los límites de la región de carga espacial (en semiconductores amorfos y orgánicos) [4].

Finalmente debe señalarse que las características eléctricas y ópticas del silicio se degeneran mucho para temperaturas superiores a los 150°C y, por ende, se limitan las posibles aplicaciones de los fotosensores que se fabrican con este material.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para el análisis de las características volt-ampéricas a diferentes temperaturas de los fotosensores de silicio fabricados en el laboratorio de Celdas Solares de Silicio del I.M.R.E., tanto en condiciones de oscuridad como de iluminación se construyó un pequeño horno que permite las variaciones de temperatura entre la ambiente y los 100°C . Las temperaturas elegidas para realizar las mediciones de las características volt-ampéricas fueron la ambiente (aproximadamente 25°C), 50, 75 y 100°C .

Los estudios se realizaron sobre fotodiodos de silicio de juntura p-n con superficie texturada y contactos de aluminio, de área pequeña (aprox. 7 mm^2).

Para analizar el comportamiento de los dispositivos bajo iluminación se midieron dos parámetros importantes: el voltaje a circuito abierto, V_{ca} y la corriente de cortocircuito, I_{cc} . El nivel de iluminación utilizado fue de 6000 lx, aproximadamente equivalente a 30 mW/cm^2 . La temperatura en la superficie de la oblea fue medida con un termopar de cobre-constantán, con una precisión de $0,01^\circ\text{C}$.

Para el procesamiento de la data experimental fue elaborado un programa de computación en lenguaje N88-Basic que permite calcular casi todos los parámetros que pueden ser obtenidos a partir de las características directa e inversa oscuras, así como directa iluminada para cada temperatura.

2.a CARACTERÍSTICAS VOLT-AMPÉRICAS OSCURAS EN RÉGIMEN DE POLARIZACIÓN DIRECTA A DIFERENTES TEMPERATURAS.

La Figura 1 muestra la característica I Vs V oscura bajo polarización directa, medida a diferentes temperaturas, de un fotodiodo típico de silicio elaborado en nuestro laboratorio.

Se observa que con el aumento de T ocurre un desplazamiento de las curvas, para un valor fijo de corriente, hacia voltajes menores, lo que corresponde con lo reportado por otros autores [2-12]. A partir de ellas se calcularon los valores de las R_s y R_p en sus respectivos rangos de voltaje. La resistencia R_p se determinó por la pendiente inversa de la curva I - V para voltajes entre 10 y 100 mV a cada temperatura y R_s para voltajes entre 700 y 800 mV.

La Figura 2 muestra la dependencia del $\ln(R_p)$ Vs T . La disminución lineal del logaritmo de R_p con T resulta coincidente con lo reportado en la literatura consultada [13]. Esta disminución de R_p es de esperar, como consecuencia del incremento de los efectos recombinativos (y, por tanto, de las corrientes de recombinación-generación) en la zona de baja polarización, que conllevan a una disminución de la pendiente inversa de la curva I Vs V .

La Figura 3 representa la dependencia del $\ln(I)$ Vs V , de la que pueden apreciarse fácilmente las ramas recombinativas y difusivas. A cada rama le fue calculado su factor de corrección, A_1 y A_2 , respectivamente y, por el método de Neugroschel [14], fue determinada la rama difusiva ideal, representada por una línea de puntos, cuyo factor de corrección, A_d , también fue calculado. Para cada una de las tres ramas fue calculada la corriente oscura de saturación correspondiente.

Para la temperatura ambiente, las ramas recombinativas y difusivas están muy bien diferenciadas, dominado las primeras para bajos voltajes de polarización y las segundas para altos voltajes de polarización. A medida que aumenta la temperatura, la definición entre una y otra rama se va perdiendo y para los 100 °C, es imposible distinguirlas. Las ramas difusivas reales se alejan más de las curvas I-V ideales a medida que se incrementa la temperatura, para el mismo intervalo de voltajes. Puede concluirse que para altas temperaturas, la conducción de corriente se debe al efecto combinado de los mecanismos difusivos y recombinativos en todo el rango de voltajes.

Las Figuras 4a y 4b muestran la dependencia semilogarítmica de la corriente oscura de saturación de la rama difusiva, I_{O2} , con el inverso de la temperatura y con la temperatura, respectivamente. La Figura 4c presenta la dependencia semilogarítmica de la corriente oscura de saturación de la rama recombinativa, I_{O1} , con la temperatura.

En la Figura 4a se puede apreciar una correspondencia lineal (confirmada por el factor de correlación de ajuste de la recta igual a 0.99) entre el $\ln(I_{O2})$ y $1/T$. Teniendo en cuenta lo reportado en la Tabla 1, se podría afirmar que uno de los mecanismos de transporte de corriente existentes en este tipo de dispositivo es el de recombinación y difusión en el volumen cuasineutral del semiconductor.

En la Figura 4b se observa también una dependencia lineal entre el $\ln(I_{O2})$ y T . Sin embargo, no podemos afirmar que el mecanismo de tunelaje directo interbandas o mediante niveles intermedios esté presente en el semiconductor ya que no se cumple la condición de que el producto del factor de corrección de la rama difusiva real por la temperatura (A_2T) sea constante, o por lo menos tienda a serlo, ni tampoco que las curvas $\ln(I)$ Vs V a diferentes temperaturas sean paralelas entre sí.

En la Figura 4c es fácil ver que el mecanismo de recombinación-generación de portadores en la zona de carga espacial de la juntura está presente, debido a que se cumple la linealidad en la curva $\ln(I_{O2})$ Vs $1/T$ y que el factor de corrección de la rama recombinativa a temperatura ambiente se encuentra en el intervalo (1,2).

2.b CARACTERÍSTICAS VOLT-AMPÉRICAS OSCURAS EN RÉGIMEN DE POLARIZACIÓN INVERSA A DIFERENTES TEMPERATURAS.

La Figura 5a representa la gráfica de I Vs V a diferentes temperaturas, en condiciones de polarización inversa. En ella se puede observar una ruptura abrupta, con un valor del voltaje de ruptura bien definido de aproximadamente 9 V. La Figura 5b muestra la dependencia térmica del voltaje de ruptura.

La dependencia del $\ln(I_{O2})$ con T se representó en la Figura 6. El valor de $\partial[\ln(I_O)]/\partial T$ correspondiente resultó ser aproximadamente igual a $0.07\ ^\circ\text{C}^{-1}$, que concuerda con lo reportado por Millman [15].

2. DEPENDENCIA DE LA CORRIENTE DE CORTOCIRCUITO I_{cc} Y EL VOLTAJE A CIRCUITO ABIERTO V_{ca} CON LA TEMPERATURA.

La Figura 7 representa la dependencia de I_{cc} con T . En ella se puede apreciar que la I_{cc} aumenta ligeramente con el incremento de la temperatura y existe una buena correspondencia lineal, dada por un factor de correlación mayor que 0.99. Este resultado concuerda con los reportados en la bibliografía consultada [2-10].

En la Figura 8 se muestra la dependencia del voltaje a circuito abierto con la temperatura para el fotodiodo estudiado. De ella se puede concluir que V_{ca} disminuye sensible y linealmente con el aumento de T y concuerda con lo observado en las Figuras 2 y 6 respecto a la disminución de R_p y al aumento de I_O con T , así como con el aumento de los efectos recombinativos en el semiconductor.

El valor de $\partial V_{ca}/\partial T$ fue de $-3.4\ \text{mV}/^\circ\text{C}$, que es del orden del valor reportado en la literatura referida, aproximadamente igual a $-2.5\ \text{mV}/^\circ\text{C}$.

CONCLUSIONES

1. DEL ANÁLISIS DE LAS CARACTERÍSTICAS VOLT-AMPÉRICAS OSCURAS BAJO POLARIZACIÓN DIRECTA EN EL INTERVALO DE TEMPERATURAS ENTRE $25\ ^\circ\text{C}$ Y $100\ ^\circ\text{C}$, SE PUEDE CONCLUIR QUE:

- a) Con el aumento de temperatura, la resistencia paralelo disminuye.
- b) En la dependencia de $\ln(I)$ con V se observa que, en la medida que aumenta la temperatura, la definición entre las ramas recombinativa y difusiva disminuye, ya que a altas temperaturas la conducción de corriente se debe al efecto combinado de los mecanismos difusivos y recombinativos en todo el rango de voltajes.
- c) En el dispositivo estudiado están presentes los siguientes mecanismos de transporte de corriente: recombinación-difusión en el volumen cuasineutral del semiconductor y recombinación-generación en la zona de carga espacial de la juntura.

2. DEL ANÁLISIS DE LAS CARACTERÍSTICAS VOLT-AMPÉRICAS OSCURAS BAJO POLARIZACIÓN INVERSA EN EL INTERVALO DE TEMPERATURA ESTUDIADO, SE PUEDE CONCLUIR QUE:

- a) El mecanismo de ruptura de la juntura es el de multiplicación por avalancha, debido a que $\partial V_r/\partial T > 0$ y $V_r > 7V$.

b) Se encontró una dependencia casi lineal entre $\ln(I_0)$ y la temperatura T y que $\partial[\ln(I_0)]/\partial T$ está en el rango de los valores reportados en la bibliografía.

3. DEL ANÁLISIS DE LAS CARACTERÍSTICAS VOLT-AMPÉRICAS BAJO ILUMINACIÓN EN EL INTERVALO DE TEMPERATURA ENTRE 25 °C Y 100 °C SE PUEDE CONCLUIR QUE:

a) La corriente de cortocircuito aumenta ligera y linealmente con el aumento de la temperatura.

b) El voltaje a circuito abierto disminuye sensible y linealmente con el incremento de la temperatura, y el valor de $\partial V_{ca}/\partial T$ está en el rango de los valores reportados en la bibliografía consultada.

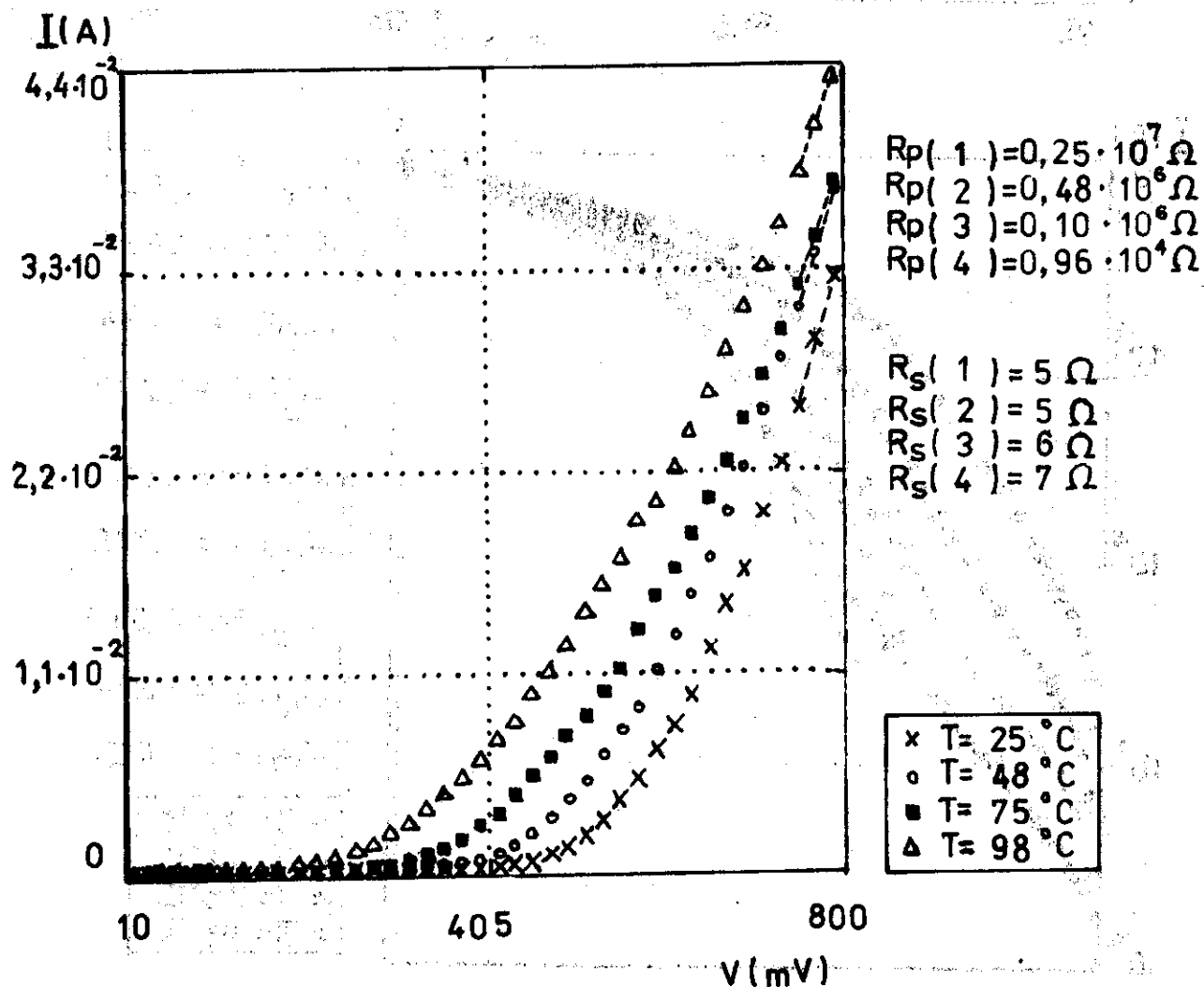


Figura 1. Característica voltampérica oscura en régimen de polarización directa a diferentes temperaturas de un fotodiodo de Si típico.

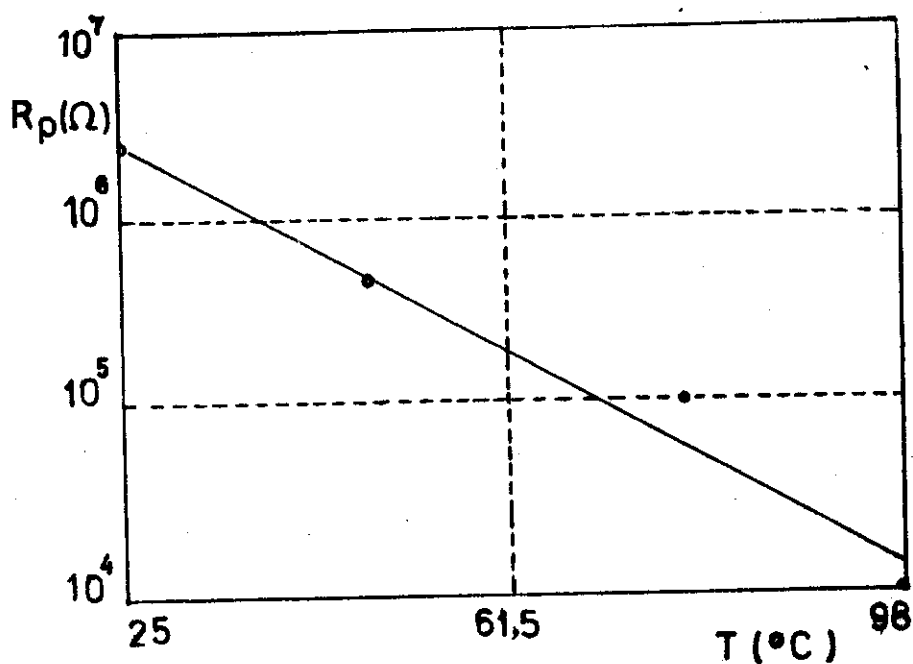
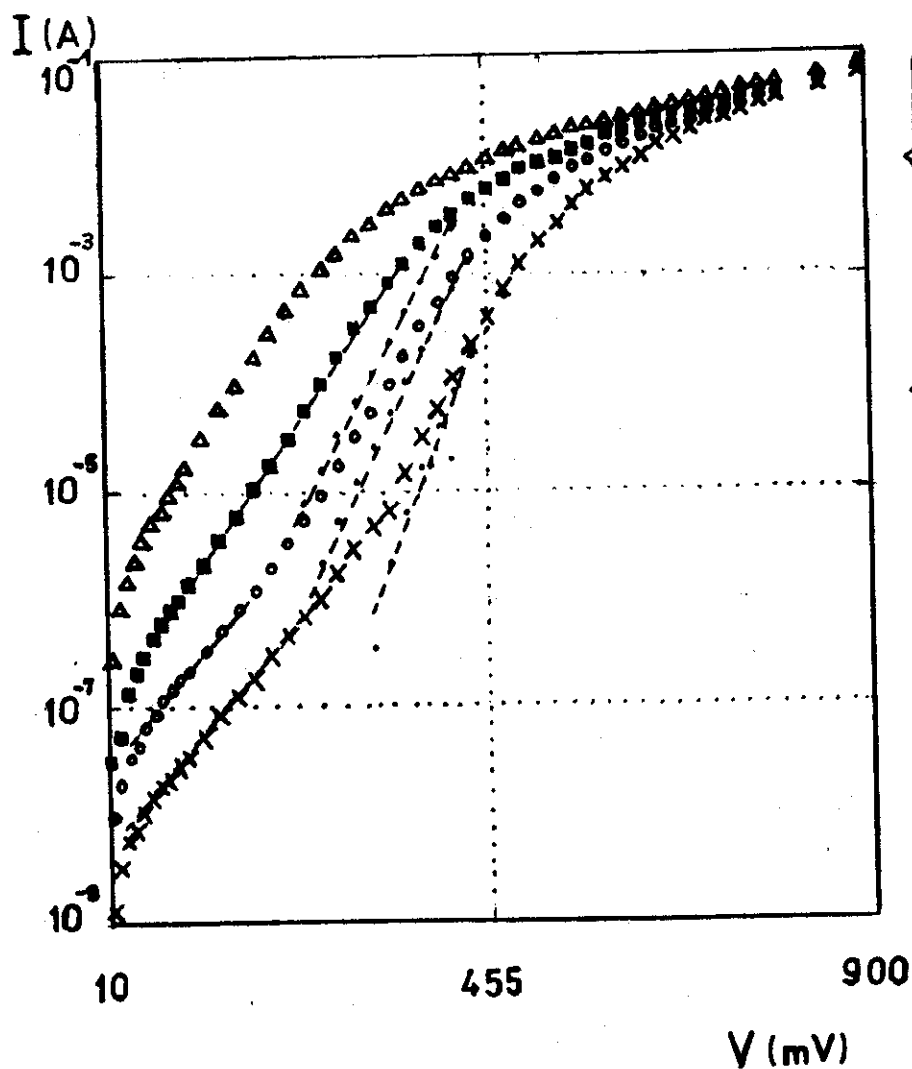


Figura 2. Dependencia semilogarítmica de la resistencia de paralelo R_p con la temperatura..



$$\begin{cases} A_1(1) = 1,947 \\ A_1(2) = 1,758 \\ A_1(3) = 1,374 \end{cases} \quad \begin{cases} A_2(1) = 1,237 \\ A_2(2) = 1,311 \\ A_2(3) = 1,290 \end{cases} \quad \begin{cases} A_d(1) = 0,910 \\ A_d(2) = 1,024 \\ A_d(3) = 1,094 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \times T = 25^\circ\text{C} \\ \circ T = 48^\circ\text{C} \\ \blacksquare T = 75^\circ\text{C} \\ \blacktriangle T = 98^\circ\text{C} \end{cases}$$

Figura 3. Dependencia semilogarítmica de la corriente con el voltaje en régimen de polarización directa y en condiciones de oscuridad.

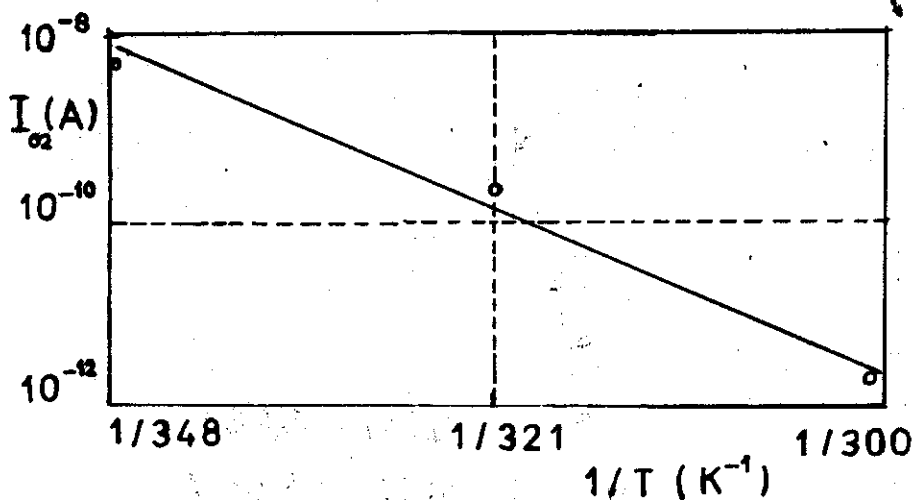


Figura 4a. Dependencia semi-logarítmica de la corriente oscura de saturación de la rama difusiva, I_{02} , con el inverso de la temperatura.

$$\begin{aligned} A(1)T(1) &= 271,2 \\ A(2)T(2) &= 328,7 \\ A(3)T(3) &= 380,7 \end{aligned}$$

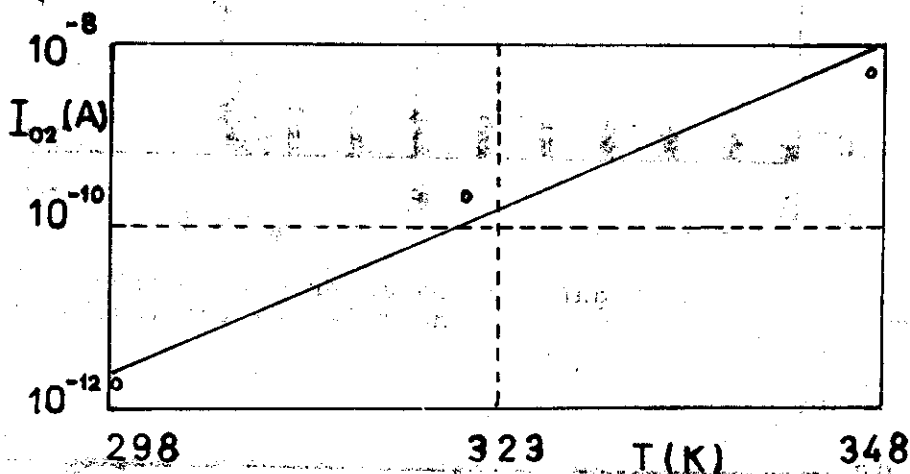


Figura 4b. Dependencia semi-logarítmica de la corriente oscura de saturación de la rama difusiva, I_{02} , con la temperatura.

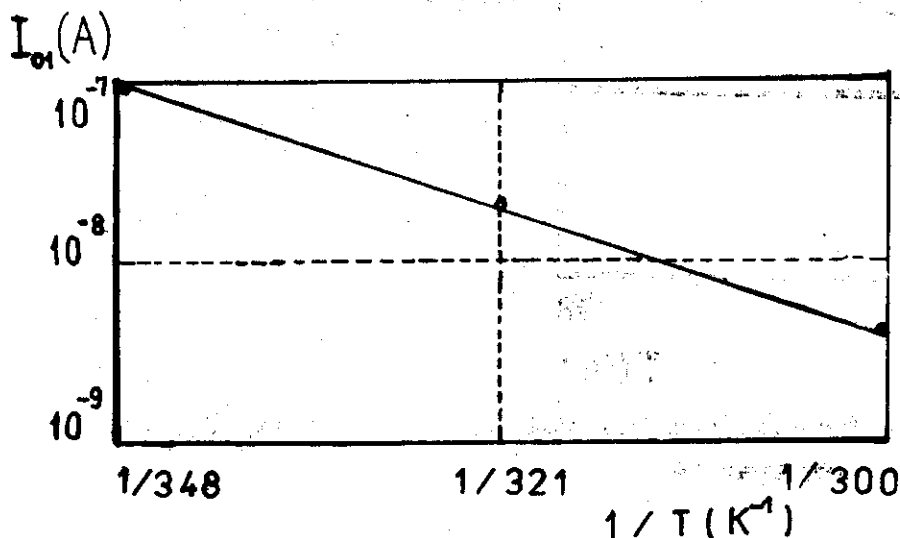


Figura 4c. Dependencia semi-logarítmica de la corriente oscura de saturación de la rama recombinativa, I_{01} , con el inverso de la temperatura.

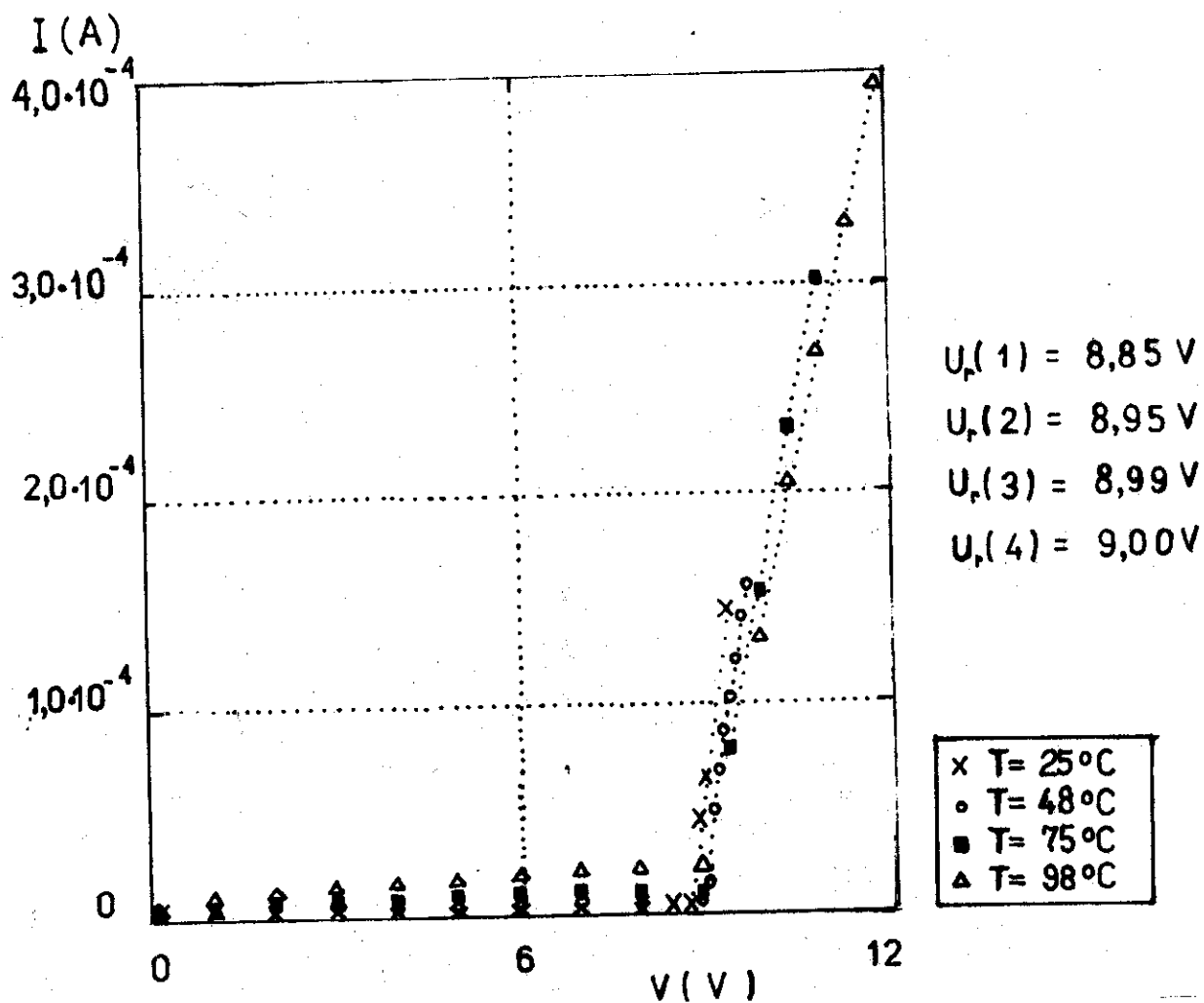


Figura 5a. Característica voltampérica oscura en régimen de polarización inversa a diferentes temperaturas.

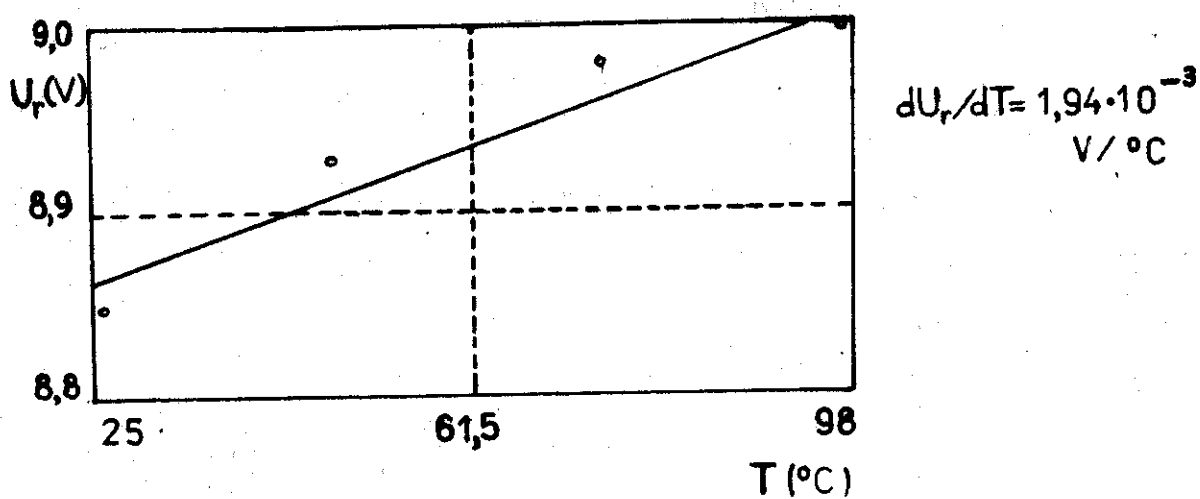
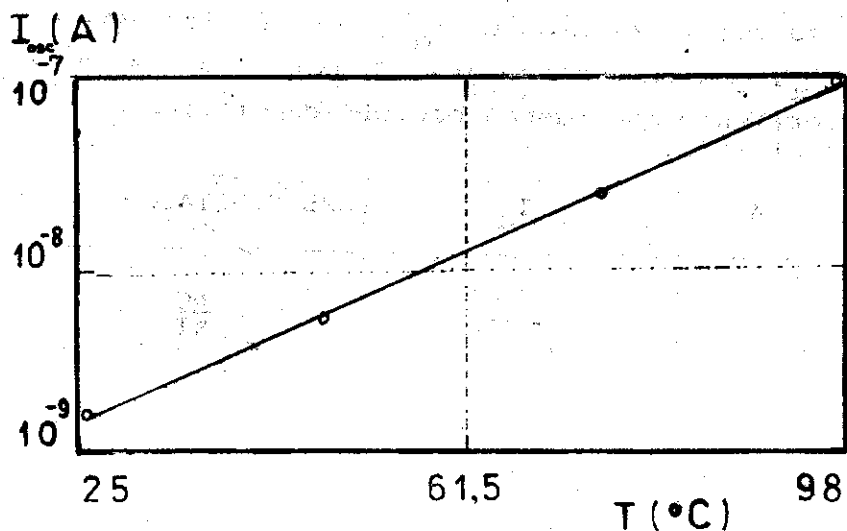


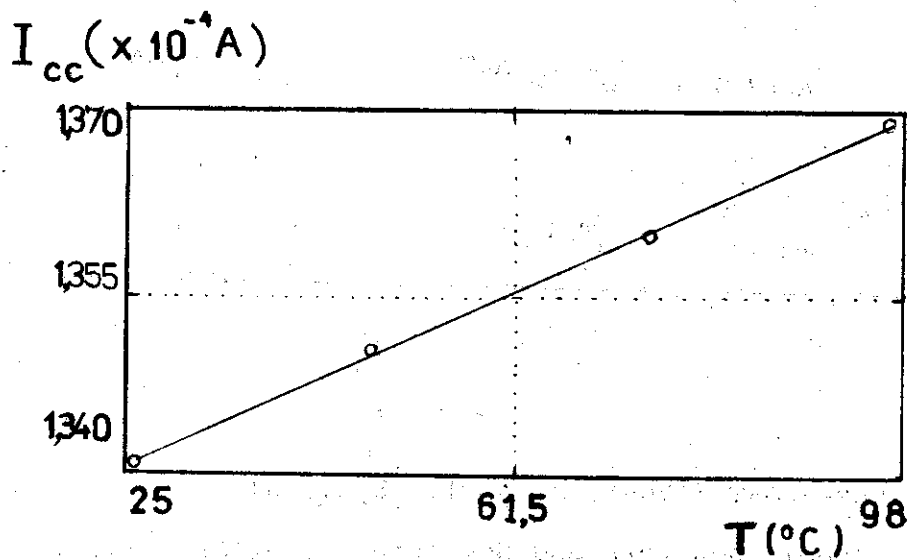
Figura 5b. Dependencia del voltaje de ruptura, V_r , con la temperatura.



$$d[\ln(I_{osc})]/dT =$$

$$= 0,074 \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$$

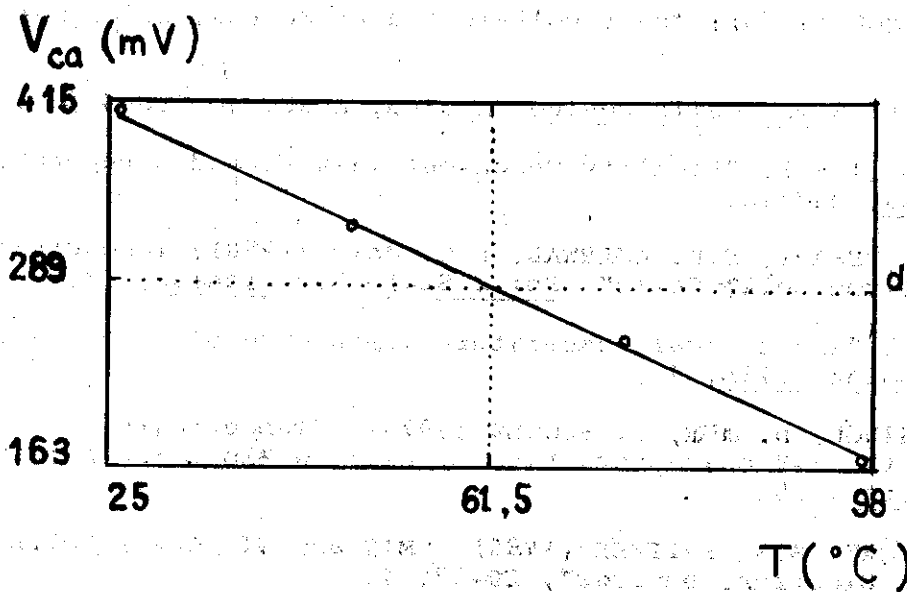
Figura 6. Dependencia semilogarítmica de la corriente inversa oscura con la temperatura.



$$dI_{cc}/dT = 4,06 \cdot 10^{-8}$$

$$\text{A} / ^\circ\text{C}$$

Figura 7. Dependencia de la corriente de cortocircuito, I_{cc} , con la temperatura.



$$dV_{ca}/dT =$$

$$-3,4 \text{ mV}/^\circ\text{C}$$

Figura 8. Dependencia del voltaje a circuito abierto, V_{ca} , con la temperatura.

Tabla 1. Dependencia de la corriente oscura, I_0 , y de los factores de corrección, A_1 , con la temperatura, T , para los distintos mecanismos de corriente que pueden ocurrir en diferentes dispositivos de silicio.

MECANISMO	A	I_0	DEPENDENCIA CON LA T
1) Recombinación y difusión en el volumen del SC.	1	$c T^3 e^{-\frac{E_g}{kT}}$	$e^{-\frac{E_g}{kT}}$
2) Recombinación generación en la zona de carga espacial.	$1 < A \leq 2$	$c T^{3/2} e^{-\frac{E_g}{AkT}}$	$e^{-\frac{E_g}{kTA}}$
3) Emisión termoiónica.	$A \geq 1$	$c T^2 e^{-\phi_b/kT}$	$e^{-\phi_b/kT}$
4) Tunelaje termoiónico.	$A=A(T) > 1$	$\sim e^{-\phi_b/AkT}$	$e^{-\phi_b/AkT}$
5) Tunelaje directo interbanda o mediante niveles intermedios.	$AT=cte$	e^{T/T_0}	e^{T/T_0}

REFERENCIAS

- [1] WYSOCKY, J.J. y P. RAPPAPORT (1960): J. Appl. Phys., 31.
- [2] HOVEL, H.J. (1975): "Semiconductors and Semimetals", Solar Cell, 11, Academy Press.
- [3] GREEN, M.A. (1982): "Solar Cell", Prentice-Hall Inc.
- [4] ASHOK, S., K.P. PANDE (1985): "Photovoltaic Measurements", Solar Cell, 14.
- [5] FONASH, S.J. (1981): Solar Cells Device Physics, Academic Press Inc.
- [6] RUIZ, J.M., M. CID (1986): "Facility Check-out Task Extended Report", Doc.: IES/WP-A3, Madrid.
- [7] AGARWALA, A., V.K. TEWARY, S.K. AGARWAL, S.C. JAIN (1980): Temperature effects in Silicon Solar Cells", Solid State Electronics, 23.
- [8] FAN, J.C.C. (1986): "Theoretical temperature dependence of solar cell parameters", Solar Cells, 17.
- [9] SHEWCHUN, J., R. SINGH, D. BURK, F. SCHOLZ (1979): "Temperature dependence of the I-V characteristics of silicon MIS solar cells", Appl. Phys. Lett., 35.
- [10] SHEWCHUN, J., D. BURK, M.B. SPITZER (1980): "MIS and SIS Solar Cells", IEEE Trans. on Electron. Devices, ED-27, 4.

- [11] WOLF, H.F. (1971): Semiconductors, John Wiley & Sons Inc.
- [12] SZE, S.M. (1981): Physics of semiconductor devices, 2 ed., John Wiley & Sons Inc.
- [13] Catálogo Hamamatsu Corp. (1991), Japón.
- [14] NEUGROSCHER, A., F.A. LINDHOLM, C.T. SAH (1977): "A method for determining the emitter and base lifetimes in p-n junction diodes", IEEE Trans. on Electron. Devices, ED-24, 6.
- [15] MILLMAN, J., C.C. HALKIAS (1984): Dispositivos y circuitos electrónicos, t.1, Ed. Pueblo y Educación.

ESTRUCTURA CRISTALINA DEL 1,1 (A - CIANO FURANO ACRILATO DE FURFURILO) 2,2 DICLOROETANO

O. Durruthy, Instituto Superior Politécnico, Santiago de Cuba.
Yu. F. Shepelev y Yu. I. Smolin, Instituto de Química de los Silicatos,
Academia de Ciencias de la URSS, Leningrado.
Ramón Pomes y Fabio Fajardo, Academia de Ciencias de Cuba.

RESUMEN

Se reporta el resultado de la determinación de la estructura cristalina del 1,1 (α -ciano furano acrilato de furfurilo) 2,2 dicloroetano, de fórmula química $C_{22}H_{16}O_6N_2Cl_2$. Los parámetros cristalográficos de la celda unitaria son: $a = 7.87$ (1); $b = 12.11$ (1); $c = 12.25$ (1) Å; $\alpha = 110.26$ (1); $\beta = 93.66$ (1) y $\gamma = 99.45^\circ$ (1). Grupo espacial P1. Se midieron 2150 F (hkl) diferentes de cero y no equivalentes, se determinaron las posiciones de todos los átomos (incluyendo los hidrógenos). La estructura se refinó hasta un valor final del factor $R = 0.029$. Se calcularon las distancias y ángulos interatómicos.

ABSTRACT

In this paper we report the investigation of the crystal structure of the 1,1 (α -cyano Furano Furfuryl Acrylate) 2,2 dichloroethane. It was used X-RAY diffraction. The parameters of the unit cell are: $a = 7.87$ (1); $b = 12.11$ (1); $c = 12.25$ (1) Å; $\alpha = 110.26$ (1); $\beta = 93.66$ (1) and $\gamma = 99.45^\circ$ (1). Space group P1. There were measured 2150 F (hkl) different from zero. The final R factor obtained in the process was 0.029. The direct method was used for the determination and the interatomic distances and angles are given.

INTRODUCCIÓN

A partir de la disolución de 0.02 moles de furfural en 20 ml de etanol absoluto, se obtuvo el C₂₂H₁₆O₆N₂C₁₂ a la cual se le adicionan 0.02 moles de cianoacetato de etilo recién destilado, luego ésta se agitó vigorosamente, añadiéndose 5 gotas de etanolato de sodio al 10 %. Transcurridos 10 minutos se separaron de la disolución unos cristales finos, el precipitado se lavó y filtró en una solución a partes iguales de etanol y agua; 0.036 moles del precipitado se mezclaron con 0.018 moles de hidrato de cloral, adicionándole a la misma 90 ml de SO₄H₂ concentrado durante 10 minutos, la temperatura se mantuvo entre 18 y 22 °C. Transcurridas dos horas de vertida la mezcla reaccionante sobre hielo picado, precipitando el compuesto deseado en forma de pequeños cristales de coloración amarilla, el que fue lavado en una solución de etanol y agua (1:1), /1/.

Con el fin de obtener monocristales de dimensiones adecuadas para la medición de los máximos de reflexión, el compuesto fue recrystalizado por el método de evaporación de una solución saturada del mismo en etanol a temperatura constante, la cual fue protegida de la incidencia directa de la radiación visible durante un período de 15 días, al cabo de los cuales se obtuvieron monocristales en forma de prisma.

La determinación de la estructura cristalina del 1,1 (α-ciano furano acrilato de furfurilo) 2,2 dicloroetano forma parte de las investigaciones estructurales que sobre los compuestos furánicos realizan los autores /2, 3/ en coordinación con el Instituto Cubano de Investigaciones de los Derivados de la Caña de Azúcar. (ICIDCA)

MATERIALES, MÉTODOS Y RESULTADOS

La selección del monocristal empleado en el experimento se realizó con ayuda de un microscopio estereoscópico, tomando en consideración que el cristal tuviera sus caras definidas y no presentara ángulos entrantes, seleccionándose un monocristal en forma de prisma de dimensiones 0.2 x 0.2 x 0.3 mm.

La determinación de la simetría y el cálculo de los parámetros cristalográficos de la celda unitaria, así como la orientación del monocristal en la cabeza goniométrica se efectuó en un difractómetro manual /4/, obteniéndose que el compuesto estudiado cristaliza en el grupo espacial, P $\bar{1}$ del sistema triclinico, con parámetros cristalográficos de la celda unitaria: $a = 7.87 (1)$; $b = 12.11 (1)$; $c = 12.25 (1) \text{ \AA}$; $\alpha = 110.26 (1)$; $\beta = 93.66 (1)$ y $\gamma = 99.45^\circ (1)$.

En la medición de las intensidades integrales se utilizó un difractómetro automático construido sobre la base del difractómetro manual /4/, el cual posee una máquina computadora M-400 acoplada, que realiza las

funciones de dirección del experimento, así como, las correcciones de los factores cinemáticos y de polarización; en el compuesto que se analiza no es necesario introducir correcciones debido al pequeño valor del coeficiente másico de absorción ($\mu = 0.07$).

Las intensidades integrales se midieron utilizando el método (w, 20) barrido con contador fijo y cristal giratorio, utilizando radiación $\text{MoK}\alpha$ monocromatizada con cristal de grafito pirolítico y un diagrama lo suficientemente ancho frente al contador, el cual permite registrar el haz difractado mientras el nudo de la red recíproca atraviesa la esfera de Edwald /5/.

En total se midieron 2150 reflexiones no nulas y no equivalentes, tomando como criterio que el número de conteos mínimos fuese mayor que $2f$ (donde f es el fondo medio para el intervalo angular en cuestión), en un campo difraccional $\sin \theta/\lambda = 1.38 \text{ \AA}^{-1}$.

Para el cálculo de la estructura se utilizó el sistema Rentgen-75 /6/, el cual incluye como un subprograma el tratamiento de los métodos directos (método multivariante), para cristales centrosimétrico y no centrosimétrico.

En calidad de conjunto de arrancada empleado para la generación de las fases 384 reflexiones de mayores valores del factor de estructura normalizado /7/ E , las 2150 $F(hkl)$ medidas aparece en la Tabla No. 1. El valor promedio del criterio de confiabilidad resultante para dicho conjunto es $\bar{\alpha} = 16.5$ /8/.

De las cinco mejores variantes calculadas /6/ teniendo en consideración los valores de R obtenidos, así como las características cristaloquímicas del compuesto, se seleccionó una variante con $R = 0.52$ y la posición en primera aproximación de 16 átomos (no hidrógenos). Mediante sucesivas síntesis de Fourier y ciclos de refinamiento se determinaron las posiciones de todos los átomos, excepto los átomos de hidrógeno. Las posiciones de estos átomos fueron refinadas sucesivamente en aproximación isotrópica y anisotrópica hasta un valor $R = 0.035$. Mediante sucesivas síntesis diferenciales de Fourier y ciclos de refinamiento se determinaron la posición de todos los átomos de hidrógeno.

La estructura determinada se refinó en aproximación anisotrópica para todos los átomos excepto los de hidrógeno, los cuales fueron refinados en aproximación isotrópica hasta un factor $R = 0.029$.

En el proceso de refinamiento se utilizó el método de los mínimos cuadrados y el programa confeccionado a tal efecto por Bussing, Martín y Levi /9/, modificado y adaptado a la VESM-6 /10/, el sistema de pesos estadísticos de Cruickshank /11/ y los factores atómicos de los átomos neutrales /12/.

En la Figura 1 aparece la proyección axonométrica de la estructura dibujada por la máquina VESM-6 con el programa ORTEP /13/ el cual fue modificado e instrumentado para dicha máquina /10/.

Las coordenadas de todos los átomos aparecen en la Tabla No. 2. Los factores térmicos anisotrópicos de los átomos de carbono, oxígeno, nitrógeno y cloro se presentan en la Tabla No. 3 y los factores isotrópicos de los átomos de hidrógeno en la Tabla No. 4.

Las distancias y ángulos de enlace se presentan en las Tablas Nos. 5 y 6, respectivamente, las mismas fueron calculadas con el programa de Bussing y otros /14/ y modificado por los autores /10/.

Se observa que los valores medios de los enlaces de C-C = 1.411 Å; C-H = 0.94 Å; C=O = 1.191 Å; C-O = 1.379 Å; C≡C1 = 1.705 Å y C≡N = 1.140 Å, concuerda con los valores reportados en literatura /15, 16/.

Se calcularon las ecuaciones de los planos de los anillos furánicos de la estructura respecto a los ejes de la celda unitaria triclinica, así como el ángulo entre los mismos, el cual es de 137.2°.

Para el anillo definido por los átomos C2, C3, C4, C5 y O3 la ecuación es: 7.058X - 1.694Y - 5.768Z = -1.378.

Para el anillo definido por los átomos C18, C19, C20, C21 y O1 es: 6.752X + 4.330Y - 1.876Z = 4.075.

Las desviaciones de los centros de "gravedad" de la densidad electrónica de los átomos de los anillos furánicos correspondientes se dan en la Tabla No. 7.

CONCLUSIONES

Se determinó la estructura cristalina del 1,1 (α-ciano furano acrilato de furfurilo) 2,2 dicloroetano, incluyendo las posiciones de todos los átomos de hidrógeno de la molécula, con un valor del factor R = 0.029.

Tabla No. 1. Conjunto de arrancada empleado para el cálculo de las fases del conjunto medido. (Las tres primeras reflexiones fijan el origen).

h	k	l	/E/	fase (grados)
-2	1	1	3.81	0
-3	-4	2	2.77	0
-2	1	0	2.22	0
2	6	0	2.41	
-2	0	2	3.31	
1	-1	9	2.70	
-4	-3	2	2.69	
-1	-5	1	2.41	
-4	1	3	2.94	
1	8	2	2.83	
-1	6	0	2.69	
-2	-1	1	3.19	

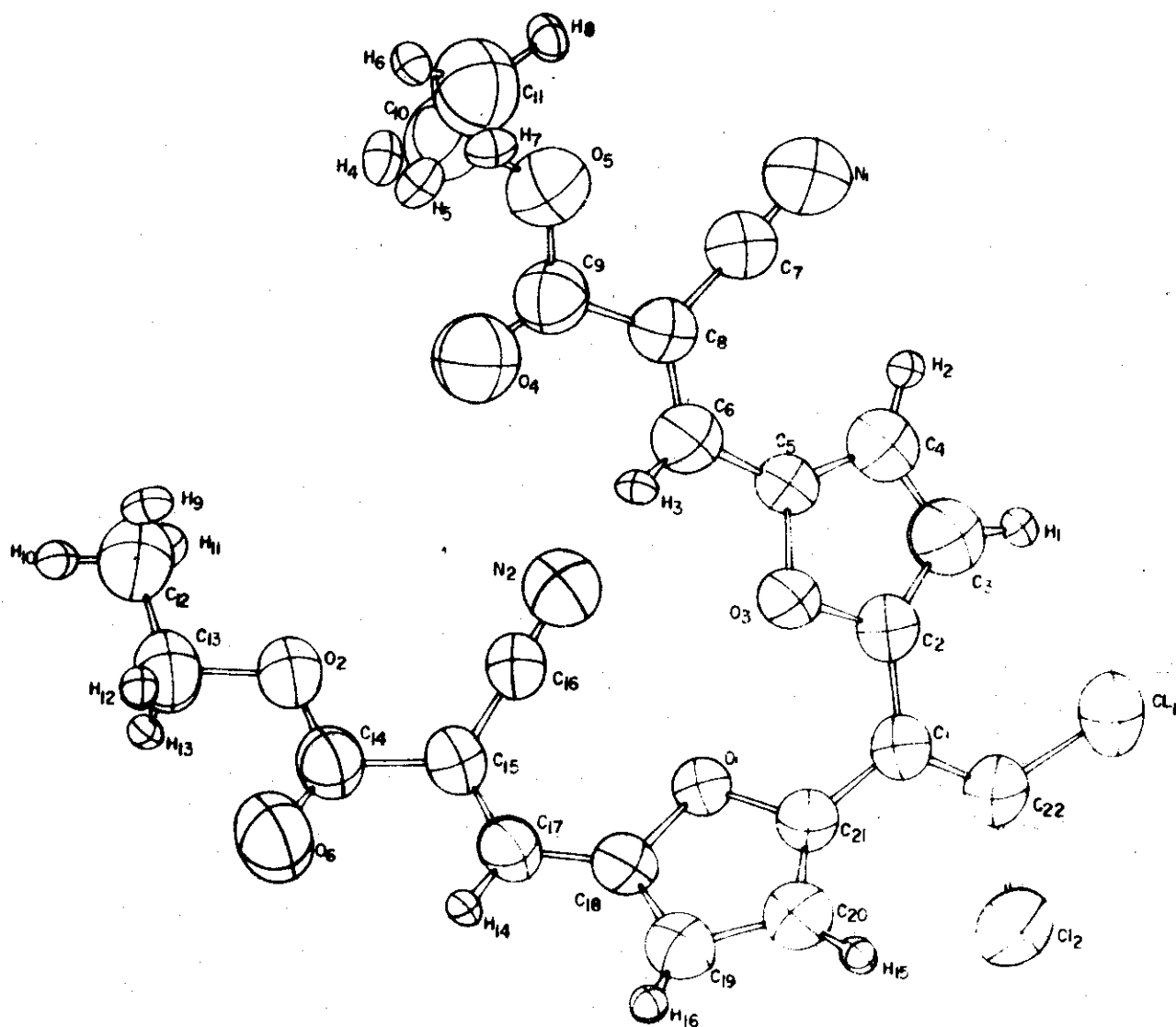


Figura 1: Proyección axonométrica de la estructura del 1,1
 (← ciano furano acrilato de furfurilo) 2,2 dicloro-
 etano.

Tabla No. 2. Coordenadas de los átomos en fracciones de periodos.

(Las desviaciones estándar de los últimos dígitos está dada entre paréntesis).

ATOMO	x	y	z
C ₁₁	0.5440(1)	0.2443(1)	0.7882(1)
C ₁₂	0.5334(1)	0.0680(1)	0.8915(1)
O ₁	0.7240(2)	0.3389(1)	0.2187(1)
O ₂	0.2793(2)	0.3801(1)	0.3525(1)
O ₃	0.1536(2)	0.5053(1)	0.8714(1)
O ₄	0.8472(3)	0.1378(2)	0.5445(1)
O ₅	0.1574(3)	0.0080(2)	0.3819(2)
O ₆	0.8077(3)	0.4593(2)	0.6644(2)
N ₁	0.0626(4)	0.0872(2)	0.8858(3)
N ₂	0.3510(4)	0.4049(2)	0.6344(2)
C ₁	0.6938(3)	0.2977(2)	0.0107(2)
C ₂	0.7449(3)	0.4248(2)	0.0261(2)
C ₃	0.7118(5)	0.4931(2)	0.9646(3)
C ₄	0.2046(4)	0.3881(2)	0.9676(3)
C ₅	0.1241(3)	0.3896(2)	0.8680(2)
C ₆	0.0264(3)	0.3024(2)	0.7634(2)
C ₇	0.0261(3)	0.1292(2)	0.8198(2)
C ₈	0.9828(3)	0.1831(2)	0.7381(2)
C ₉	0.8825(3)	0.1043(2)	0.6217(2)
C ₁₀	0.2603(4)	0.0990(3)	0.4865(3)
C ₁₁	0.4351(4)	0.1367(3)	0.4594(3)
C ₁₂	0.2946(4)	0.2035(2)	0.1913(2)
C ₁₃	0.2700(4)	0.3297(2)	0.2254(2)
C ₁₄	0.7624(3)	0.5122(2)	0.6050(2)
C ₁₅	0.7449(3)	0.4642(2)	0.4744(2)
C ₁₆	0.3082(3)	0.4637(2)	0.5868(2)
C ₁₇	0.7820(3)	0.3545(2)	0.4196(2)
C ₁₈	0.7780(3)	0.2912(2)	0.2985(2)
C ₁₉	0.8276(3)	0.1865(2)	0.2398(2)
C ₂₀	0.8067(3)	0.1685(2)	0.1195(2)
C ₂₁	0.7434(3)	0.2627(2)	0.1093(2)
C ₂₂	0.6041(3)	0.2151(2)	0.9101(2)
H ₁	0.637(4)	0.472(3)	0.886(3)
H ₂	0.197(4)	0.320(3)	0.992(3)
H ₃	0.984(3)	0.333(2)	0.712(3)
H ₄	0.219(4)	0.102(3)	0.554(3)
H ₅	0.328(5)	0.063(3)	0.516(3)
H ₆	0.503(3)	0.186(3)	0.525(3)
H ₇	0.484(4)	0.070(3)	0.442(3)
H ₈	0.435(4)	0.158(3)	0.384(3)
H ₉	0.202(4)	0.154(3)	0.205(3)
H ₁₀	0.280(4)	0.175(2)	0.111(3)
H ₁₁	0.412(4)	0.203(3)	0.222(3)
H ₁₂	0.159(4)	0.336(3)	0.196(3)
H ₁₃	0.366(4)	0.383(2)	0.203(2)
H ₁₄	0.819(3)	0.312(2)	0.466(2)
H ₁₅	0.835(4)	0.104(2)	0.055(3)
H ₁₆	0.878(4)	0.140(2)	0.273(2)

Tabla No. 3. Coeficientes del factor térmico anisotrópico. ($\times 10^4$)

$$T = \exp \left[-(B_{11}h^2 + B_{22}K^2 + B_{33}l^2 + B_{12}hk + B_{13}hl + B_{23}kl) \right]$$

ATOMOS	B ₁₁	B ₂₂	B ₃₃	B ₁₂	B ₁₃	B ₂₃
C ₁₁	277	90	31	10	-38	32
C ₁₂	300	52	64	-35	-39	12
N ₁	377	67	88	75	1	77
N ₂	324	79	54	130	40	67
O ₁	135	41	31	39	27	29
O ₂	210	68	29	70	3	34
O ₃	167	48	41	9	-15	45
O ₄	252	94	74	-5	-81	61
O ₅	271	59	78	-45	2	22
O ₆	373	113	41	221	22	73
C ₁	144	48	32	36	32	29
C ₂	169	49	28	25	18	25
C ₃	396	59	57	8	-114	62
C ₄	362	43	54	20	-55	64
C ₅	157	54	42	27	19	47
C ₆	143	45	51	21	3	50
C ₇	197	51	62	39	16	39
C ₈	132	65	53	21	16	43
C ₉	131	86	63	10	24	40
C ₁₀	268	129	75	81	40	-18
C ₁₁	206	87	72	4	-32	67
C ₁₂	245	85	41	59	4	21
C ₁₃	236	79	22	78	0	29
C ₁₄	158	62	38	55	2	52
C ₁₅	142	38	28	34	6	45
C ₁₆	188	61	28	50	28	26
C ₁₇	139	48	37	26	-9	54
C ₁₈	145	55	47	20	9	52
C ₁₉	185	51	49	57	24	58
C ₂₀	191	43	49	51	38	33
C ₂₁	142	59	34	6	18	24
C ₂₂	173	67	37	19	29	22

Tabla No. 4. Coeficiente del factor térmico isotrópico de los átomos de hidrógeno.

$$T = \exp (-B \sin^2 \theta / \lambda).$$

ATOMOS	B
H ₁	4.06
H ₂	3.82
H ₃	2.03
H ₄	5.99
H ₅	6.22
H ₆	2.53
H ₇	4.07
H ₈	5.34
H ₉	3.65
H ₁₀	2.69
H ₁₁	3.19
H ₁₂	2.42
H ₁₃	1.94
H ₁₄	0.81
H ₁₅	1.80
H ₁₆	1.53

Tabla No. 5. Distancias interatómicas en Å. (Las desviaciones estándar de los últimos dígitos está dada entre paréntesis).

C ₁₁	-	C ₂₂	1.705 (3)	C ₁₂	-	C ₂₂	1.707 (3)
O ₁	-	C ₁₈	1.373 (3)	O ₁	-	C ₂₁	1.374 (3)
O ₂	-	C ₁₃	1.454 (2)	O ₂	-	C ₁₄	1.330 (3)
O ₃	-	C ₂	1.359 (3)	O ₃	-	C ₅	1.367 (3)
O ₄	-	C ₉	1.186 (4)	O ₅	-	C ₉	1.326 (3)
O ₅	-	C ₁₀	1.452 (4)	O ₆	-	C ₁₄	1.196 (4)
N ₁	-	C ₇	1.141 (4)	N ₂	-	C ₁₆	1.139 (4)
C ₁	-	C ₂	1.469 (3)	C ₁	-	C ₂₁	1.464 (4)
C ₁	-	C ₂₂	1.348 (3)	C ₂	-	C ₃	1.338 (5)
C ₃	-	C ₄	1.406 (4)	C ₄	-	C ₅	1.345 (4)
C ₅	-	C ₆	1.420 (4)	C ₆	-	C ₈	1.346 (3)
C ₇	-	C ₈	1.424 (4)	C ₈	-	C ₉	1.495 (4)
C ₁₀	-	C ₁₁	1.467 (5)	C ₁₂	-	C ₁₃	1.487 (4)
C ₁₄	-	C ₁₅	1.492 (4)	C ₁₅	-	C ₁₆	1.426 (4)
C ₁₅	-	C ₁₇	1.351 (3)	C ₁₇	-	C ₁₈	1.411 (4)
C ₁₈	-	C ₁₉	1.357 (3)	C ₁₉	-	C ₂₀	1.407 (4)
C ₂₀	-	C ₂₁	1.355 (4)	C ₃	-	H ₁	0.99 (3)
C ₄	-	H ₂	0.95 (4)	C ₆	-	H ₃	0.90 (3)
C ₁₀	-	H ₄	0.89 (5)	C ₁₀	-	H ₅	0.89 (5)
C ₁₁	-	H ₆	0.93 (2)	C ₁₁	-	H ₇	0.92 (3)
C ₁₁	-	H ₈	1.01 (5)	C ₁₂	-	H ₉	0.94 (3)
C ₁₂	-	H ₁₁	0.97 (3)	C ₁₃	-	H ₁₂	0.95 (3)
C ₁₃	-	H ₁₃	1.02 (3)	C ₁₇	-	H ₁₄	0.95 (3)
C ₁₉	-	H ₁₆	0.92 (3)	C ₂₀	-	H ₁₅	0.97 (2)

REFERENCIAS

- / 1/ BARTROLI, R., L. LAMI y M. DÍAZ (1984): Comunicación Privada.
- / 2/ FAJARDO, F., Yu. F. SHEPELEV, Yu. I. SMOLIN y R. POMÉS (1984):
Rev. Cubana de Física, IV(2): 9.
- / 3/ Idem, IV(2): 17.
- / 4/ POMÉS, R. (1982): Tesis en opción al Grado de Doctor en Ciencias,
Universidad de Humboldt, Berlín, RDA.
- / 5/ JAMES, R.W. (1962): The Optical of the Diffraction of X-ray., London,
G. Ben and Sons, Ltd.
- / 6/ ANDRIANOV, V.I., Z.Ch. SAFINA, B.L. TARNOPOSIKII (1975): Rentgen-75,
Automatizirovanaia Sistema Programm Dlia Raschifrouski Struktur
Kristallov, Otdel Instituta Jimicheskoi-Fiziki Akad. Nauk SSSR.
- / 7/ KARLE, I.L., (1969): Acta Cryst., B25,2119.
- / 8/ KARLE, J. and I.L. KARLE (1966): Acta Cryst., 21, 849.
- / 9/ BUSSING, W.R., K.O. MARTIN and H.A. LEVY (1962): Oak Ridge National
Lab. Report, ORNL-TM 305, Tennessee.
- /10/ POMÉS, R., Yu. F. SHEPELEV y Yu. I. SMOLIN (1977): Rev. Ciencias
Naturales y Matemáticas, 1(2): 44.
- /11/ CRUICKSHANK, D.J.W. and D.E. PHILLING (1967): Computing Methods an
the Phase Problems in X-ray Cryst. Anal., Pergamon Press-England.
- /12/ CROMER, D.T. and J.T. WABER (1965): Acta Cryst., 18, 104.
- /13/ JOHNSON, C.K. (1965): ORTEP, A Fortran Thermal Ellipsoid Plot Programm
for Crystal Structur Illustrations., Oak Ridge National Lab.
- /14/ BUSSING, W.R., K.O. MARTIN and M.A. LEVY (1962): Oak Ridge National
Lab. Report ORNL-TM-306, Tennessee.
- /15/ KITAIGORODSKII, A.J., P.M. ZURKII, B.K. BELSKII (1980): Stroenie
Organicheskovo, Vechestra, Izdatelstvo Nauka, Mosckva.
- /16/ KITAIGORODSKII, A.J. (1971): Molekuliarnie Kristalli, Izdatelsvo
Nauka, Mosckva.

CALCULO Y ANALISIS DE BOBINAS CORRECTORAS DEL CAMPO MAGNETICO PARA EQUIPOS DE RMNI CON NUCLEO DE AIRE:

I. BOBINAS SADDLE-SHAPED

L. Bergues-C. y F. Reguera M., Centro de Biofísica Médica (CBM), Universidad de Oriente.

RESUMEN

Se hace un cálculo teórico de la componente z del campo magnético (B_z) para distintas configuraciones de bobinas correctoras en forma de silla de montura (saddle-shaped). Obtenidas las expresiones de B_z se hace un análisis para eliminar o minimizar el o los órdenes más bajos de los gradientes no deseables, y maximizar el orden del gradiente deseado. También se calculan los parámetros óptimos de cada configuración de bobinas.

ABSTRACT

It is made a theoretical calculus of z component of B_z (magnetic field) for different configurations of saddle-shaped shim coils. Once you obtain B_z expressions you analyze them to eliminate or minimize the lowest order or orders of not desired gradients and to make maximum the order of the desired gradient. Besides, every optimal parameter of each configuration of coils is calculated.

1. INTRODUCCIÓN

Para el diseño de equipos de Resonancia Magnética Nuclear de Imágenes (RMNI) uno de los factores fundamentales que se ha de tener en cuenta es la obtención de campos magnéticos homogéneos (10^{-4} a 10^{-6}). Factores prácticos como el enrollado de bobinas, el maquinado, las fijaciones mecánicas, la ubicación de las bobinas en sus posiciones previamente calculadas, la estructura metálica, el medio que rodea al sistema magnético, etc., afectan la homogeneidad del campo magnético. Estos factores traen como consecuencia que aparezcan gradientes naturales en el sistema magnético; para la corrección de estos gradientes naturales se diseñan bobinas (shims) que pueden ser pasivas o activas. Los shims pasivos son láminas ferromagnéticas de alta susceptibilidad magnética, los cuales concentran y corrigen las curvas de las líneas del campo; esto trae como consecuencia que la homogeneidad del campo mejore, estos shims pueden tener forma de lazos circulares con un área de sección transversal dada; pueden ser pedazos o elementos de volumen que tengan forma rectangular, esféricas. Los shims activos son bobinas que hacen una corrección más fina a la homogeneidad, estos se caracterizan por ser ortogonales e independientes unos de los otros. Los gradientes producidos por los shims se obtienen del desarrollo ortogonal de los armónicos esféricos [1, 2]. En [2] se hace un análisis completo de la teoría del cálculo de estos shims usando un desarrollo en armónicos esféricos.

En el presente trabajo se hace un análisis detallado del cálculo de los shims utilizando un desarrollo de Fourier-Bessel; para corregir las inhomogeneidades se procede a eliminar los gradientes de más bajos órdenes no deseables y maximizar el orden del gradiente deseado.

2. FORMULISMO MATEMÁTICO

Turner en [3, 7] hace una discusión de bobinas de gradientes montadas en un cilindro de radio a , el cual es coaxial con el apantallamiento; la corriente inducida en el apantallamiento está confinada a la superficie de un cilindro de radio b . Entonces él describe la corriente como:

$$J = F(z, \varphi) \delta(\rho - a) + f(z, \varphi) \delta(\rho - b) \quad (1)$$

donde

$F(z, \varphi)$ describe la corriente en la bobina.

$f(z, \varphi)$ describe la corriente inducida en el apantallamiento.

El objetivo del trabajo es el cálculo de B_z debido a las diferentes configuraciones de shims; la influencia de estos campos sobre el campo principal B_0 , orientado según el eje z , es despreciable porque la corriente que circula por estas bobinas es pequeña, además, los efectos

de la autoinductancia por cercanía son despreciables, al igual que las corrientes parásitas que puedan influir en los conductores de B_0 ; por estas razones el segundo término de la ecuación (1) no es tomado en consideración y se tiene que:

$$J = F(z, \varphi) \delta(\rho - a) \quad (1a)$$

A la función $F(z, \varphi)$ es útil definir un tipo de Transformada de Fourier según [3]

$$F_{\varphi}^m(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-im\varphi} d\varphi \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikz} F_{\varphi}(z, \varphi) dz \quad (2a)$$

$$F_z^m(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-im\varphi} d\varphi \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikz} F_z(z, \varphi) dz \quad (2b)$$

Usemos el vector potencial magnético ($\vec{A}$) en coordenadas cilíndricas para describir el campo magnético. Las componentes A_{ρ} , A_{φ} y A_z vienen dadas por:

$$A_z = \frac{\mu_0 a}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\varphi} e^{ikz} I_m(k\rho) K_m(ka) F_z^m(k) dk \quad (3)$$

$$A_{\rho} = - \frac{i\mu_0 a}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\varphi} e^{ikz} \left[I_{m-1}(k\rho) K_{m-1}(ka) - I_{m+1}(k\rho) K_{m+1}(ka) \right] F_{\varphi}^m(k) dk \quad (4)$$

$$A_{\varphi} = \frac{\mu_0 a}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{im\varphi} e^{ikz} \left[I_{m-1}(k\rho) K_{m-1}(ka) + I_{m+1}(k\rho) K_{m+1}(ka) \right] F_{\varphi}^m(k) dk \quad (5)$$

Donde $I(x)$ y $K(x)$ son las funciones de Bessel que pueden ser evaluadas por sus desarrollos polinomiales.

La componente z del campo magnético en coordenadas cilíndricas viene dada por:

$$B_z = \rho^{-1} \left[\frac{\partial(\rho A_{\varphi})}{\partial \rho} - \frac{\partial A_{\rho}}{\partial \varphi} \right] \quad (6)$$

Sustituyendo (4) y (5) en (6) se obtiene:

$$B_z = - \frac{\mu_0 a}{\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} k e^{im\varphi} e^{ikz} F_{\varphi}^m(k) I_m(k\rho) K'_m(ka) dk \quad (7)$$

que es la expresión general del campo en la dirección z .

Para la obtención de la componente B_z de las diferentes bobinas shims, se procederá de la siguiente manera:

Se propone para cada tipo de configuración de bobina, una forma específica de la función $F_\varphi(\varphi, z)$. Una vez obtenida esta se le halla su transformada de Fourier $F_\varphi^m(k)$ dada por (2a), luego se sustituye en la expresión (7) y se determina la componente B_z para cada configuración de shim. $F_\varphi(\varphi, z)$ se construirá mediante la función Paso Unitario de Heaviside ($H(x)$) y de la delta de Dirac ($\delta(x)$).

Estas bobinas están caracterizadas por su radio a , ancho angular $\Delta\psi$ de los arcos, las distancias a que están estos con respecto al centro del sistema d_i ($i = 1, 2, \dots$). La selección óptima de los parámetros $\Delta\psi$ y la relación d_i/a es escogida de la eliminación o minimización del gradiente o de los gradientes de más bajos órdenes no deseados, de forma tal que estos parámetros maximicen el orden del gradiente deseado. Luego de conocer el valor o los valores de d_i estos se relacionan con los ángulos α_i a través de $\text{tg}\alpha_i = \frac{a}{d_i}$ ($i = 1, 2, \dots$). Los α_i son comparados con los reportados en [2].

Una vez descrito en forma general el procedimiento del cálculo de B_z para las diversas configuraciones de shims y cómo proceder para la optimización de los parámetros, a continuación se ejemplifican algunas de estas configuraciones.

3. EJEMPLOS

a) La Figura 1 muestra dos pares de bobinas saddle-shaped que producen un campo $B_z \sim \rho \cos(\varphi)$ (en coordenadas cartesianas $B_z \sim x$). Para esta configuración, eligiendo de forma adecuada el sentido de la corriente (I) en los arcos (se escoge el sentido positivo de I en el sentido horario) se propone la forma $F_\varphi(\varphi, z)$ de la siguiente manera:

$$F_\varphi(\varphi, z) = I \left[\delta(z - d_1) + \delta(z + d_1) - \delta(z - d_2) - \delta(z + d_2) \right] \cdot \left\{ H(\varphi + \pi/3) \left[1 - H(\varphi - \pi/3) \right] - H(\varphi - 2\pi/3) \left[1 - H(\varphi + 2\pi/3) \right] \right\} \quad (8)$$

Sustituyendo (8) en (2a) y luego en (7) se obtiene

$$B_z = - \frac{4\mu_0 a I}{\pi^2} \sum_{m=1,5,7,11,\dots}^{\infty} \frac{\cos(m\varphi) \sin(m\pi/3)}{m} \int_{-\infty}^{\infty} k \cos(kz) \left[\cos(kd_1) - \right]$$

$$- \cos(kd_2) \Big] I_m(k\rho) K'_m(ka) dk \quad (9)$$

$$B_z = - \frac{4\mu_0 a I}{\pi^2} \left[\sin(\pi/3) I_1^1 \cos\varphi + \frac{\sin(5\pi/3)}{5} I_2^1 \cos(5\varphi) + \right. \\ \left. + \frac{\sin(7\pi/3)}{7} I_3^1 \cos(7\varphi) + \dots \right] \quad (9a)$$

donde

$$I_1^1 = I_{1a}^1 \rho + I_{1b}^1 \rho^3 + I_{1c}^1 \rho^5 + I_{1d}^1 \rho^7 + I_{1e}^1 \rho^9 \pm \dots$$

$$I_2^1 = I_{2a}^1 \rho^5 + I_{2b}^1 \rho^7 + I_{2c}^1 \rho^9 \pm \dots$$

$$I_3^1 = I_{3a}^1 \rho^7 + I_{3b}^1 \rho^9 \pm \dots$$

Luego de haberse obtenido la expresión de B_z para esta configuración se procede a optimizar los parámetros de la bobina para lograr que el término de primer orden $I_{1a}^1 \rho$ sea máximo, por lo que basta anular el coeficiente del término de tercer orden $I_{1b}^1 \rho^3$. De aquí se obtienen los valores d_1 y d_2 .

$$d_1 = \pm 0.389295a \Rightarrow \alpha_1 = \pm 68.72928553^\circ$$

$$d_2 = \pm 2.568745a \Rightarrow \alpha_2 = \pm 21.27072251^\circ$$

Con esta misma configuración rotada 90° alrededor del eje z se calcula el campo $B_z \sim \rho \sin(\varphi)$ (en coordenadas cartesianas $B_z \sim y$) y se obtienen los mismos valores de d_1 y d_2 .

b) La Figura 2.a muestra un par de bobinas saddle-shaped que produce un campo $B_z \sim \rho z \cos(\varphi)$ (en coordenadas cartesianas $B_z \sim xz$). Para $F_\varphi(\varphi, z)$ se propuso:

$$F_\varphi(\varphi, z) = I \left[\delta(z+d) - \delta(z-d) \right] \left\{ H(\varphi+\pi/3) \left[1-H(\varphi-\pi/3) \right] - \right. \\ \left. - H(\varphi-2\pi/3) \left[1-H(\varphi+2\pi/3) \right] \right\} \quad (10)$$

Sustituyendo (10) en (2a) y luego en (7) se tiene

$$B_z = - \frac{4\mu_0 a I}{\pi^2} \sum_{m=1,5,7,11,\dots}^{\infty} \frac{\cos(m\varphi) \sin(m\pi/3)}{m} \int_{-\infty}^{\infty} k \sin(kz) \sin(kd) \cdot \\ \cdot I_m(k\rho) K'_m(ka) dk. \quad (11)$$

$$B_z = \frac{4\mu_0 a I}{\pi^2} \left[\sin(\pi/3) I_1^2 \cos \varphi + \frac{\sin(5\pi/3)}{5} I_2^2 \cos(5\varphi) + \frac{\sin(7\pi/3)}{7} I_3^2 \cos(7\varphi) + \dots \right] \quad (11a)$$

donde

$$I_1^2 = - \left[I_{1a}^2 \rho z + I_{1b}^2 \rho^3 z + I_{1c}^2 \rho^5 z + I_{1d}^2 \rho^7 z + I_{1e}^2 \rho^9 z \pm \dots \right]$$

$$I_2^2 = - \left[I_{2a}^2 \rho^5 z + I_{2b}^2 \rho^7 z + I_{2c}^2 \rho^9 z \pm \dots \right]$$

$$I_3^2 = - \left[I_{3a}^2 \rho^7 z + I_{3b}^2 \rho^9 z \pm \dots \right]$$

Se desea que el término de segundo orden $\rho z \cos(\varphi)$ sea máximo, para ello basta anular el coeficiente del término de cuarto orden $I_{1b}^2 \rho^3 z$, obteniéndose de aquí los valores de d .

$$d = \pm 0.677964a \Rightarrow \alpha = \pm 55.86414243^\circ$$

ó

$$d = \pm 3.128956a \Rightarrow \alpha = \pm 17.72364153^\circ$$

Pero por criterios prácticos como son el tamaño de la bobina, la inductancia, se escoge la solución

$$d = \pm 0.677964a \Rightarrow \alpha = \pm 55.86414243^\circ$$

Con esta misma configuración rotada 90° alrededor del eje z se genera un campo $B_z \sim \rho z \sin(\varphi)$ (en coordenadas cartesianas $B_z \sim yz$) y se obtiene el mismo valor para d , por las mismas razones prácticas antes mencionadas. Estos mismos shims xz ó yz pueden lograrse con la configuración mostrada en la Figura 2.b, donde se obtuvo:

$$d_1 = \pm 0.677964a \Rightarrow \alpha_1 = \pm 55.86414243^\circ$$

$$d_2 = \pm 3.128956a \Rightarrow \alpha_2 = \pm 17.72364151^\circ$$

c) La Figura 3 muestra dos pares de bobinas saddle-shaped ortogonales, de las cuales un par (configuración A) produce un campo $B_z \sim \rho^2 z \cos(2\varphi)$ (en coordenadas cartesianas $z(x^2 - y^2)$) y el otro par (configuración B) produce un campo $B_z \sim \rho^2 z \sin(2\varphi)$ (en coordenadas cartesianas $z(2xy)$). Sólo nos limitaremos a la configuración A debido a que la B es idéntica pero rotada 90° . Para $F_\varphi(\varphi, z)$ se encontró:

$$B_z = \frac{4\mu_0 a I}{\pi^2} \left[\frac{\sin(\pi/3)}{1} I_1^2 \cos \varphi + \frac{\sin(5\pi/3)}{5} I_2^2 \cos(5\varphi) + \frac{\sin(7\pi/3)}{7} I_3^2 \cos(7\varphi) + \dots \right] \quad (11a)$$

donde

$$I_1^2 = - \left[I_{1a}^2 \rho^2 z + I_{1b}^2 \rho^3 z + I_{1c}^2 \rho^5 z + I_{1d}^2 \rho^7 z + I_{1e}^2 \rho^9 z \pm \dots \right]$$

$$I_2^2 = - \left[I_{2a}^2 \rho^5 z + I_{2b}^2 \rho^7 z + I_{2c}^2 \rho^9 z \pm \dots \right],$$

$$I_3^2 = - \left[I_{3a}^2 \rho^7 z + I_{3b}^2 \rho^9 z \pm \dots \right]$$

Se desea que el término de segundo orden $\rho z \cos(\varphi)$ sea máximo, para ello basta anular el coeficiente del término de cuarto orden $I_{1b}^2 \rho^3 z$, obteniéndose de aquí los valores de d.

$$d = \pm 0.677964a \Rightarrow \alpha = \pm 55.86414243^\circ$$

$$d = \pm 3.128956a \Rightarrow \alpha = \pm 17.72364153^\circ$$

Pero por criterios prácticos como son el tamaño de la bobina, la inductancia, se escoge la solución

$$d = \pm 0.677964a \Rightarrow \alpha = \pm 55.86414243^\circ$$

Con esta misma configuración rotada 90° alrededor del eje z se genera un campo $B_z \sim \rho z \sin(\varphi)$ (en coordenadas cartesianas $B_z \sim yz$) y se obtiene el mismo valor para d, por las mismas razones prácticas antes mencionadas. Estos mismos shims xz ó yz pueden lograrse con la configuración mostrada en la Figura 2.b, donde se obtuvo:

$$d_1 = \pm 0.677964a \Rightarrow \alpha_1 = \pm 55.86414243^\circ$$

$$d_2 = \pm 3.128956a \Rightarrow \alpha_2 = \pm 17.72364151^\circ$$

c) La Figura 3 muestra dos pares de bobinas saddle-shaped ortogonales, de las cuales un par (configuración A) produce un campo $B_z \sim \rho^2 z \cos(2\varphi)$ (en coordenadas cartesianas $z(x^2 - y^2)$) y el otro par (configuración B) produce un campo $B_z \sim \rho^2 z \sin(2\varphi)$ (en coordenadas cartesianas $z(2xy)$). Sólo nos limitaremos a la configuración A debido a que la B es idéntica pero rotada 90° . Para $F_\varphi(\varphi, z)$ se encontró:

$$F_{\varphi}(\varphi, z) = I \left[\delta(z+d) - \delta(z-d) \right] \left\{ H(\varphi+\pi/3) \left[1 - H(\varphi-\pi/3) \right] + \right. \\ \left. + H(\varphi-2\pi/3) \left[1 - H(\varphi+2\pi/3) \right] \right\}. \quad (12)$$

Sustituyendo (12) en (2a) y luego en (7) obtenemos

$$B_z = \frac{4\mu_0 a I}{\pi^2} \sum_{m=2,4,6,\dots}^{\infty} \frac{\cos(m\varphi) \sin(m\pi/3)}{m} \int_{-\infty}^{\infty} k \sin(kz) \sin(kd) \cdot I_m(k\rho) K'_m(ka) dk. \quad (13)$$

$$B_z = - \frac{4\mu_0 a I}{2} \left[\frac{\sin(2\pi/3)}{2} I_1^3 \cos(2\varphi) + \frac{\sin(4\pi/3)}{4} I_2^3 \cos(4\varphi) + \right. \\ \left. + \frac{\sin(8\pi/3)}{8} I_3^3 \cos(8\varphi) + \dots \right] \quad (13a)$$

donde

$$I_1^3 = - \left[I_{1a}^3 \rho^2 z + I_{1b}^3 \rho^4 z + I_{1c}^3 \rho^6 z + I_{1d}^3 \rho^8 z \pm \dots \right],$$

$$I_2^3 = - \left[I_{2a}^3 \rho^4 z + I_{2b}^3 \rho^6 z + I_{2c}^3 \rho^8 z \pm \dots \right],$$

$$I_3^3 = - \left[I_{3a}^3 \rho^8 z \pm \dots \right].$$

El término de tercer orden $\rho^2 \cos(2\varphi)$ es el que se quiere maximizar, por lo que basta anular el coeficiente del término de quinto orden $I_{1b}^3 \rho^4 z$.

Resultando de aquí los valores de d:

$$d = \pm 0.582312a \Rightarrow \alpha = \pm 59.78724341^\circ$$

o

$$d = \pm 2.27176a \Rightarrow \alpha = \pm 23.75844964^\circ$$

Por razones prácticas, como se mencionó anteriormente, la solución escogida fue:

$$d = \pm 0.582312a \Rightarrow \alpha = \pm 23.78724341^\circ$$

d) La Figura 4 muestra cuatro pares de bobinas saddle-shaped, dos pares (configuración A) ortogonales a los otros dos (configuración B).

La configuración A genera un campo $B_z \sim \rho^2 \cos(2\varphi)$ en coordenadas cartesianas ($x^2 - y^2$) y la configuración B produce un campo $B_z \sim \rho^2 \sin(2\varphi)$ (en coordenadas cartesianas ($2xy$)). El cálculo que se hace para la

configuración A es válido para la B, ya que sólo se diferencian en que una está rotada 90° con respecto a la otra. Encontramos entonces que:

$$F_\varphi(\varphi, z) = I \left[\delta(z - d_1) + \delta(z + d_1) - \delta(z - d_2) - \delta(z + d_2) \right] \left\{ H(\varphi + \pi/3) \cdot \left[1 - H(\varphi - \pi/3) \right] + H(\varphi - 2\pi/3) \left[1 - H(\varphi + 2\pi/3) \right] \right\}. \quad (14)$$

Sustituyendo (14) en (2a) y esta en (7) se tiene que

$$B_z = - \frac{4\mu_0 a I}{\pi^2} \int_{m=2,4,8\dots}^{\infty} \frac{\cos(m\varphi) \sin(m\pi/3)}{m} \int_{-\infty}^{\infty} k \cos(kz) \left[\cos(kd_1) - \cos(kd_2) \right] I_m(k\rho) K'_m(ka) dk. \quad (15)$$

$$B_z = - \frac{4\mu_0 a I}{2} \left[\frac{\sin(2\pi/3)}{2} I_1^4 \cos(2\varphi) + \frac{\sin(4\pi/3)}{4} I_2^4 \cos(4\varphi) + \frac{\sin(8\pi/3)}{8} I_3^4 \cos(8\varphi) + \dots \right] \quad (15a)$$

donde

$$I_1^4 = I_{1a}^4 \rho^2 + I_{1b}^4 \rho^4 + I_{1c}^4 \rho^6 + I_{1d}^4 \rho^8 + I_{1e}^4 \rho^{10} \pm \dots$$

$$I_2^4 = I_{2a}^4 \rho^4 + I_{2b}^4 \rho^6 + I_{2c}^4 \rho^8 + I_{2d}^4 \rho^{10} \pm \dots$$

$$I_3^4 = I_{3a}^4 \rho^6 + I_{3b}^4 \rho^8 + I_{3c}^4 \rho^{10} \pm \dots$$

Si se anula el coeficiente del término de cuarto orden $I_{1b}^4 \rho^4$, se tiene que el término de segundo orden $I_{1a}^4 \rho^2$ es máximo. Del anulamiento de I_{1b}^4 se obtienen los valores de d_1 y d_2 .

$$d_1 = \pm 0.334613a \Rightarrow \alpha_2 = \pm 71.49908898^\circ$$

$$d_2 = \pm 1.929085a \Rightarrow \alpha_2 = \pm 27.40134173^\circ$$

4. DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

De los ejemplos calculados anteriormente podemos afirmar que para el diseño de estas bobinas debe hacerse una representación esquemática de las configuraciones y fijar los sentidos de circulación de las corrientes en los arcos (como se muestran en las figuras). Se propone $F_\varphi(\varphi, z)$ para la configuración seleccionada, esta función describe por qué parte de la bobina circula corriente y el sentido de esta, así como, las posiciones de

los arcos o de las espiras. A $F_{\varphi}(\varphi, z)$ se le halla su transformada de Fourier según (2) y se sustituye en (7) obteniéndose la expresión de la componente B_z de la configuración deseada. La ecuación (7), que hemos obtenido, es una expresión general que se puede extender no sólo a bobinas saddle-shaped, sino también a bobinas circulares, elípticas, rectangulares, parabólicas, etc. Además esta expresión puede utilizarse para el cálculo de bobinas de gradientes con las formas antes mencionadas, por ejemplo la ecuación (9) coincide con la que se reporta en [3] si en esta última se desprecia el efecto del apantallamiento y se considera el cálculo para $\rho < a$.

Para las bobinas circulares a diferencia de lo que se ha visto se propone $F_{i\varphi}(\varphi, z) = I_i \delta(z - d_i)$ ($i = 1, \dots, \rho$), donde ρ describe el número total de bobinas circulares presentes en la configuración, I_i es la corriente que circula por el i -ésimo lazo, $\delta(z - d_i)$ fija la posición del i -ésimo lazo con respecto al centro de la configuración, en este caso la función Paso Unitario de Heaviside en el proceso de integración es la unidad.

Se comparó los resultados obtenidos con los que se reportan en [2] y coincidieron, a pesar de esto, nuestro desarrollo ofrece ciertas ventajas; en primer lugar se puede extender fácilmente a las formas de bobinas antes mencionadas; en segundo lugar, las expresiones obtenidas son más cómodas de emplear que las que se reportan en [2], ya que es menos laborioso trabajar una suma integral que una suma discreta, los términos se obtienen de manera directa y sencilla. El resultado (7) tiene forma más compacta y menos engorrosa de la que se propone en [2]; puede ser aplicada al cálculo de shims para corregir órdenes superiores, la eliminación de estos provoca que el campo magnético sea más homogéneo y puedan usarse en equipos de Espectroscopía (requieren de 10^{-8} a 10^{-10} de homogeneidad), en equipos de RMNI superconductores (de 10^{-6} a 10^{-8}), etc. En el caso de bobinas de gradientes en la cual se usen combinaciones de bobinas para producir un gradiente lo más lineal posible, también es válida (7).

Para la resolución de estas integrales se consultaron [4], [5] y [6].

6. AGRADECIMIENTOS

Agradecemos la colaboración del Prof. R. Dagel S., por sus sugerencias en el cálculo matemático y al Dr. R. Riera A. por sus sugerencias y corrección en la elaboración de este trabajo.

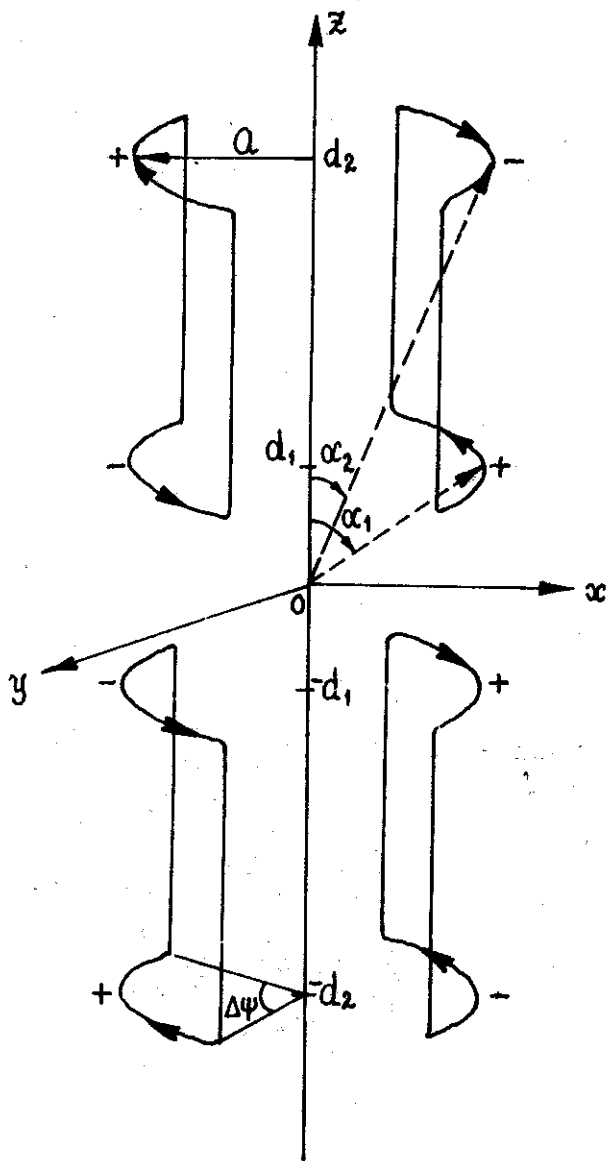


FIG. 1

Figura 1. Muestra dos pares de bobinas saddle-shaped que producen un campo B_z x .

Figura 2. Muestra dos configuraciones de bobinas que producen un campo B_z xz . La Figura 2.a representa un par de bobinas saddle-shaped; y la Figura 2.b destaca una configuración de dos pares de bobinas, equivalente a la mostrada en la Figura 2.a.

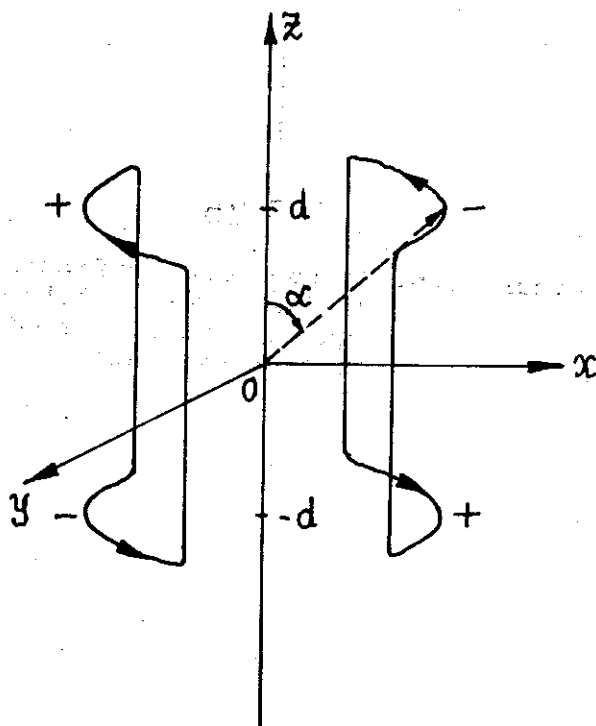


FIG. 2a

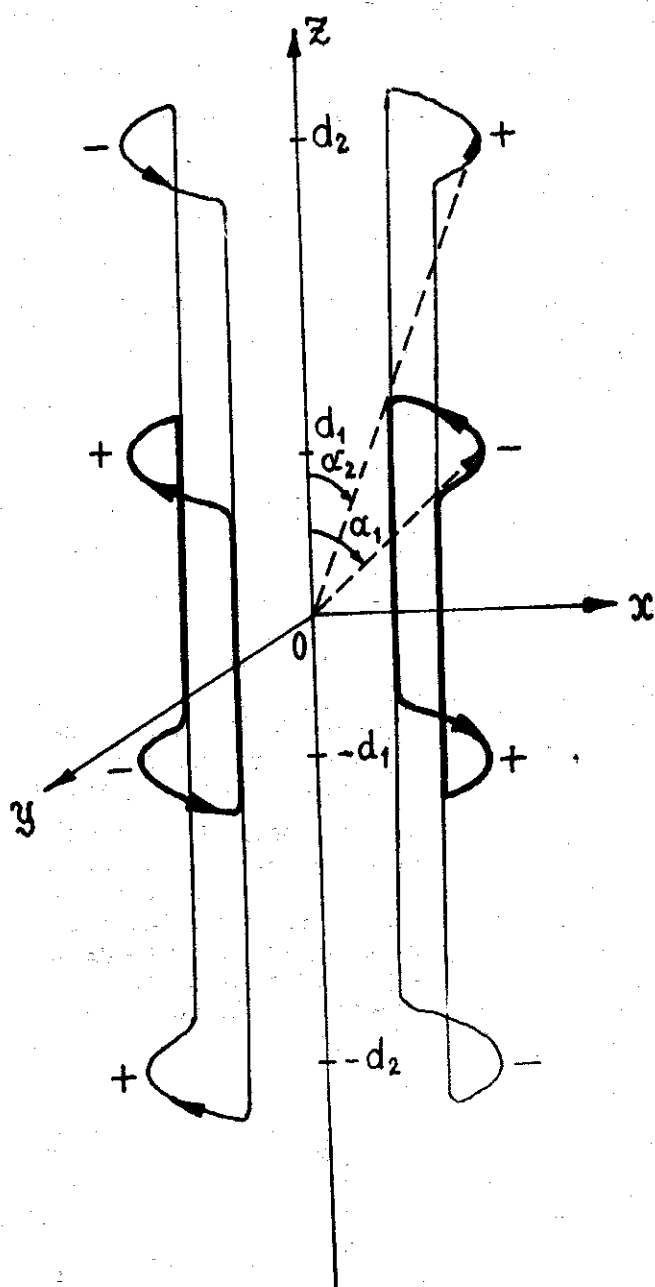


FIG. 2b

Figura 2.b. Destaca una configuración de dos pares de bobinas, equivalente a la mostrada en la Figura 2.a.

Figura 3. Muestra dos pares de bobinas saddle-shaped: un par está representado por la configuración A, que produce un campo $B_z = z(x^2 - y^2)$, y el otro por la configuración B que produce un campo $B_z = x(2xy)$.

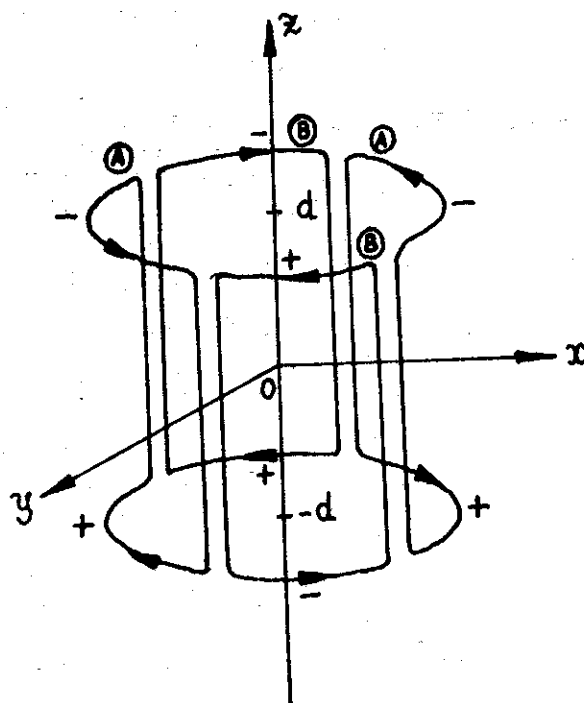


FIG. 3

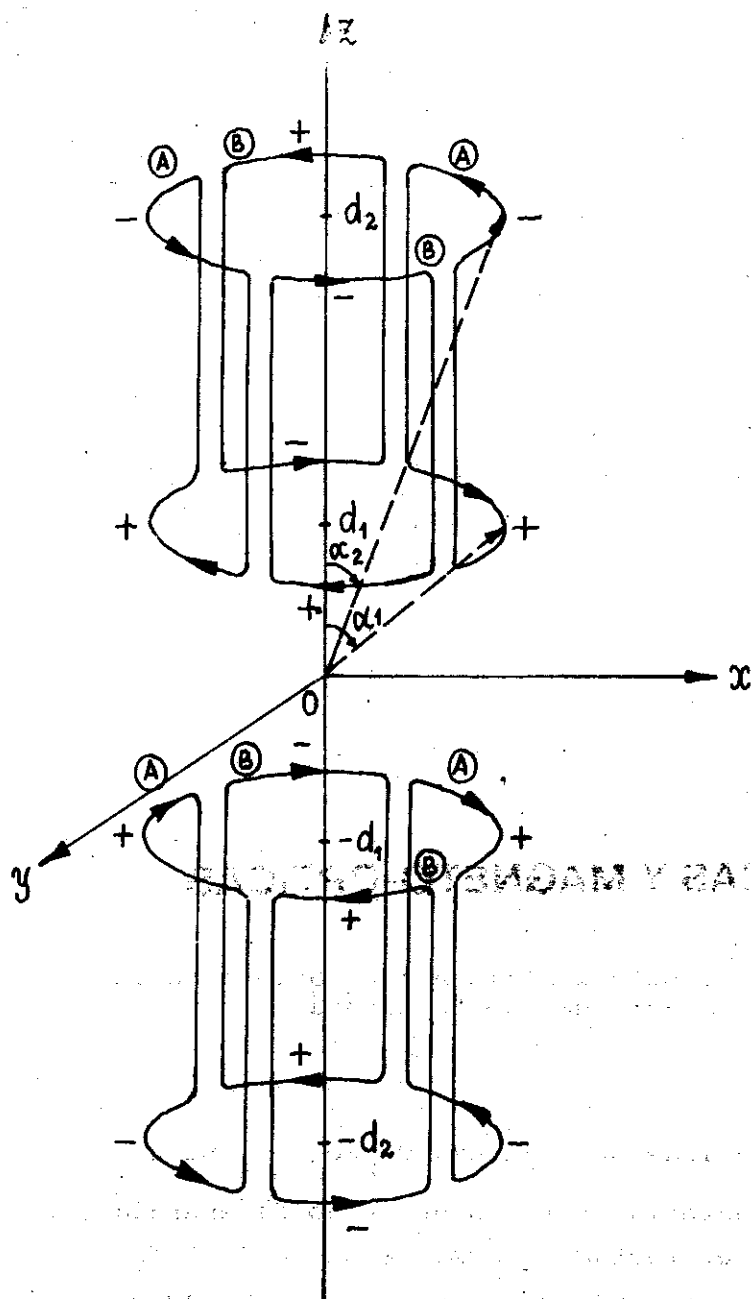


FIG.4

Figura 4. Muestra 4 pares de bobinas: dos pares están representados por la configuración A, que produce un campo $B_z (x^2 - y^2)$, y el otro por la configuración B que produce un campo $B_z (2xy)$.

7. REFERENCIAS

- [1] ANDERSON, N.A. (1961): Rev. Sci. Instrum., 32, 241-250.
- [2] ROMEO, F. and D.I. Hoult (1984): Magn. Reson. in Medicine, 1, 44-65.
- [3] TURNER, R. and R. BOWLEY (1986): J. Phys. E: Sci. Instrum.
- [4] DITKIN, V.A. and A.P. PRUDNIKOV (1965): "Integral Transforms and Operational Calculus", Pergamon Press.
- [5] LEBEDEV, V.N. (1965): Special function and Their applications, Prentice-Hall, INC. Englewood, Cliffs, N.J.
- [6] SPIEGEL, M.R.: Manual de Fórmulas y Tablas Matemáticas, Editorial Dossat, S.A.
- [7] TURNER, R. (1986): J. Phys. D: Appl. Phys., 19, 147-155.

PROPIEDADES MAGNETICAS Y MAGNETO-OPTICAS DEL SISTEMA Co-Fe-O

Eudaldo G. Tarajano, Gustavo López, Rafael Avila Avila, Sergio García,
Laboratorio de Magnetismo, IMRE, Universidad de La Habana.

RESUMEN

Se estudiaron muestras policristalinas del sistema $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ para $0,06 < x < 0,08$ por el Efecto Ecuatorial Kerr en un rango de energía entre 1,0 y 3,5 eV antes y después de ser tratadas térmicamente a 1000 °C durante dos horas. Las muestras fueron obtenidas por coprecipitación a partir de sulfatos. Se comparan los espectros de las muestras sin tratar con el de la magnetita y con los de las muestras tratadas térmicamente.

Analizando la transición del ión Fe^{+2} en los sitios octaédricos, se infieren que no debe ocurrir una redistribución catiónica a esa temperatura. Se calcula la distribución catiónica de una muestra de CoFe_2O_4 tratada térmicamente, mediante espectrometría Mossbauer, llegándose a la conclusión de que ocurre una redistribución catiónica convirtiéndose de una espinela inversa a una no completamente inversa.

ABSTRACT

Polycrystalline samples of the $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ system, $0,06 < x < 0,08$ were studied by equatorial Kerr Effect in the 1,0 to 3,5 eV range, before and after a heat treatment at 1000 °C for two hours. The powders were obtained

using the coprecipitation technique, starting from the corresponding sulphates. From the comparison between the obtained spectra and the one of the magnetite it is concluded that no redistribution of cations takes place. Also the annealed sample of CoFe_2O_4 was characterized using Mossbauer spectrometry, and some considerations concerning structural changes and cation distribution are presented.

INTRODUCCIÓN

En los últimos años se ha desarrollado gran interés en el estudio de las propiedades ópticas, magnéticas y magnetoópticas del sistema $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$, por no existir un criterio unificado en la naturaleza de las transiciones ópticas y la distribución catiónica en las subredes magnéticas.

De Grave y colaboradores^[1] estudiaron este sistema para valores de $x < 0,04$ mediante espectrometría Mossbauer donde se obtuvo que el ión Co^{2+} ocupa solamente los sitios octaédricos.

Sin embargo otros autores^[2,3] consideran que teniendo en cuenta la forma en que fueron obtenidas las muestras puede haber una migración de los iones Co^{2+} de los sitios octaédricos hacia los sitios tetraédricos, resultando un cambio de espinela inversa a no completamente inversa.

Algo similar ocurre con la naturaleza de las transiciones ópticas del sistema estudiado que hay autores^[4,5] que consideran que existe alrededor de 2,0 eV una línea ancha asociada a la contribución de la transferencia de carga del ión Co^{2+} en sitios octaédricos y una transición del campo cristalino $4A_2 \rightarrow 4T_1$ del mismo ión en sitios tetraédricos.

Nosotros mediante difracción de neutrones obtuvimos que para $x = 0.8$ y 0.1 la estructura cristalina era completamente inversa, lo que significa que el ión Co^{2+} solamente puede ocupar sitios octaédricos^[6].

Mediante una técnica de magnetometría vibracional a temperatura de helio líquido se obtuvo la distribución catiónica de este sistema, resultando que para valores de $x > 0.1$ y $x < 0.8$ existía una migración del ión Co^{2+} de sitios octaédricos hacia sitios tetraédricos y para valores de $x < 0.1$, independiente del tratamiento térmico se obtuvo una estructura espinela inversa.

Este trabajo completa el estudio del efecto ecuatorial de Kerr para valores de $x < 0.1$ donde se comprueba que los espectros M-O para muestras tratadas térmicamente con las no tratadas, son similares, estando de acuerdo con los resultados de la distribución catiónica para los mismos valores de x para los cuales no se apreciaba una redistribución catiónica en las muestras tratadas térmicamente.

RESULTADOS EXPERIMENTALES Y DISCUSIÓN

La Figura 1 muestra el resultado de las mediciones del efecto ecuatorial de Kerr, para las ferritas del sistema $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ con $x = 0.06, 0.07$ y 0.08 . Las investigaciones fueron realizadas para un ángulo de incidencia de la luz de 60° .

En dicha Figura se observa que alrededor de 1.5 eV aparece un máximo cuya magnitud crece en la medida que se reduce el contenido del ión Co^{2+} . Este crecimiento concuerda con el aumento del contenido de hierro. En el trabajo^[8] los autores reportan para la magnetita el ancho positivo máximo en la región de 1.1 a 1.3 eV , explicándose este máximo para la transferencia de carga del ión $\text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Fe}^{3+}$ en sitios octaédricos.

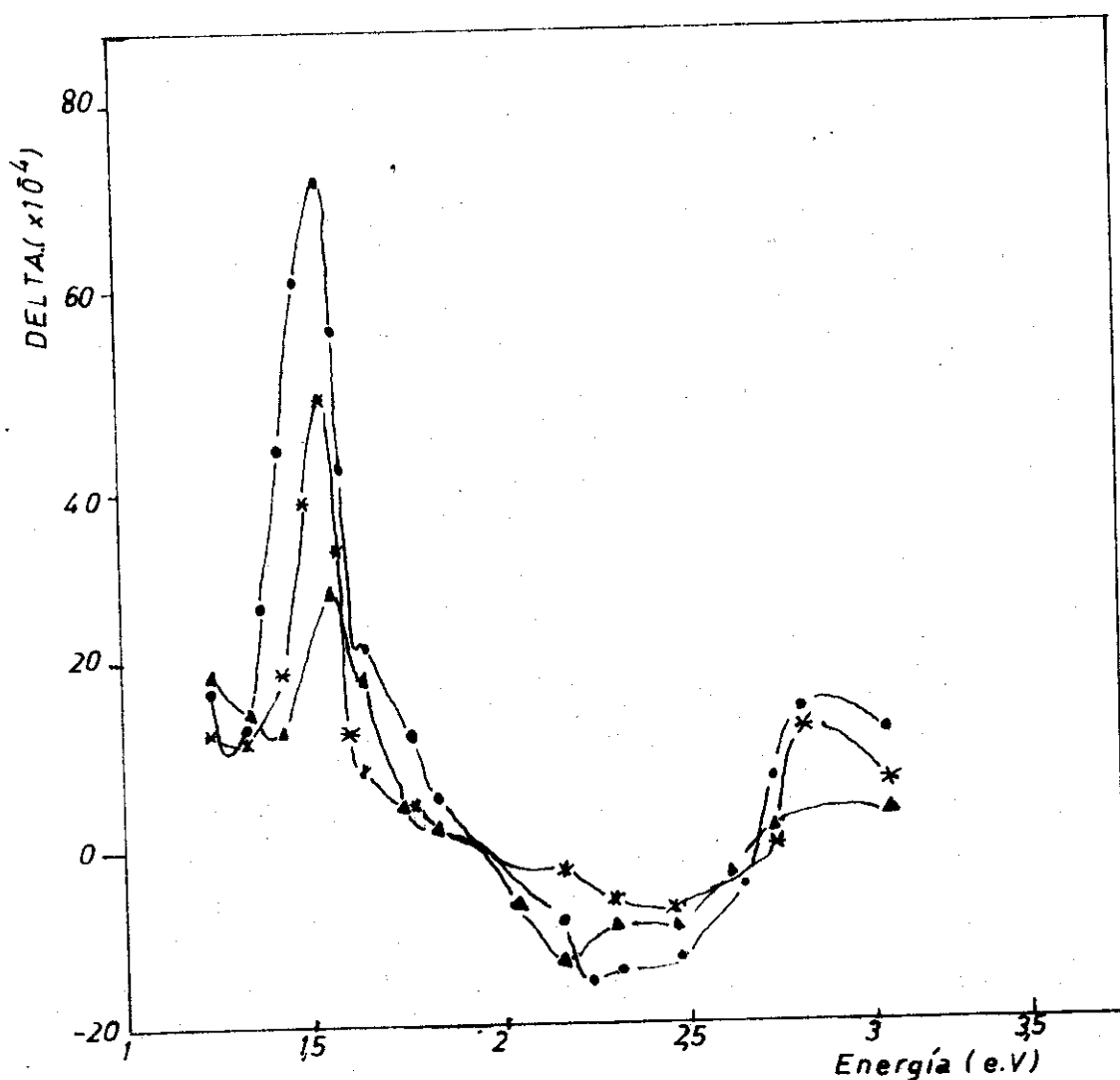


Figura 1. Espectros magneto-ópticos para el sistema $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ sin tratamiento térmico y ángulo de 60° ($x=0.06; 0.07; 0.08$): [— • —] $\text{Co}_{0.06}\text{Fe}_{2.94}\text{O}_4$; — * — $\text{Co}_{0.07}\text{Fe}_{2.93}\text{O}_4$; — ▲ — $\text{Co}_{0.08}\text{Fe}_{2.92}\text{O}_4$.

Investigaciones del efecto polar de Kerr realizadas por Simsa y Siroky^[9], muestran que tiene lugar una dependencia de la concentración fuertemente lineal en la región de 1.1 eV de las parejas Fe^{2+} - Fe^{3+} en coordinaciones octaédricas. En dicha región aparece la transición permitida por el spin $5T_{2g}(5D) \rightarrow 5E_g(5D)$ del ión Fe^{2+} en sitios octaédricos.

La influencia de iones de Fe^{2+} en el espectro magneto-óptico se reduce al producirse un incremento del ión Co^{2+} , inclusive si dicho incremento ocurriese en proporciones del orden de las centésimas.

En el trabajo^[7] queda demostrado que para $x = 0.1$ la dependencia espectral obtenida es parecida al espectro de la ferrita de Co. Sin embargo, para valores de $x < 0.1$ cambia radicalmente la forma del espectro, como se deduce de nuestros resultados ya que el espectro es similar al de la magnetita y no al de la espinela de Co.

En la Figura (II) aparecen los espectros magneto-ópticos obtenidos para los mismos valores de x después de ser sometidas las muestras a un tratamiento térmico adicional a la temperatura de 1000°C en régimen de argón. Las mediciones se realizaron de forma análoga a las efectuadas a las muestras sin tratamiento térmico. Como se puede apreciar en dicha Figura aparece un máximo en la región alrededor de 1.5 eV con características similares al observado en las muestras de la misma composición que no sufrieron tratamiento térmico adicional. También se observa el aumento significativo del valor de δ (DELTA) con la reducción de la cantidad de Co^{2+} .

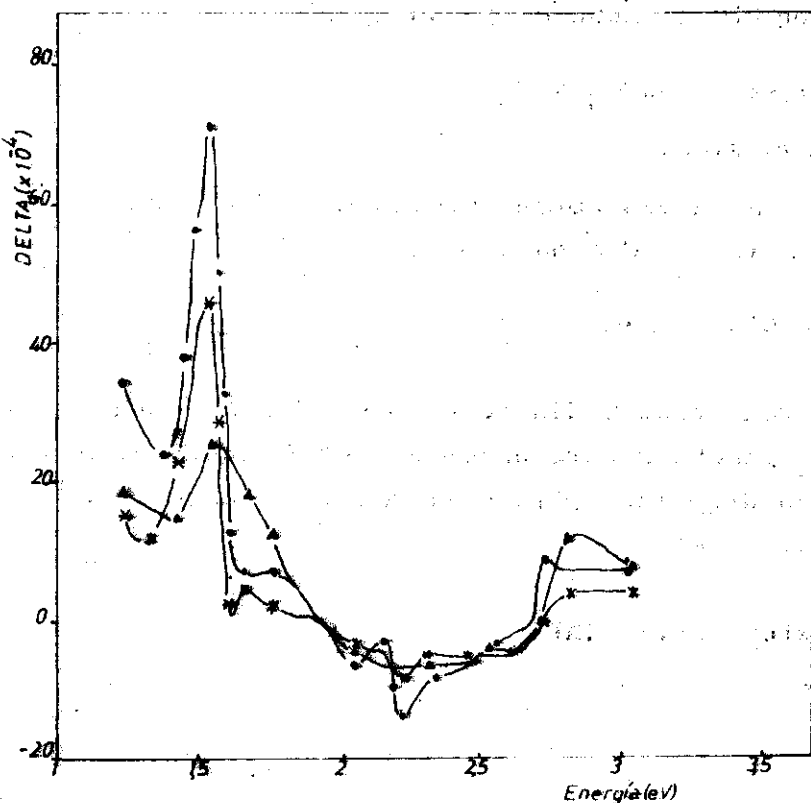


Figura 2. Espectros magneto-ópticos para el sistema $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ con tratamiento térmico de dos horas a 1000°C y ángulo de 60° ($x=0.06$; 0.07 ; 0.08): [—•—] $\text{Co}_{0.06}\text{Fe}_{2.94}\text{O}_4$; —*— $\text{Co}_{0.07}\text{Fe}_{2.93}\text{O}_4$; —▲— $\text{Co}_{0.08}\text{Fe}_{2.92}\text{O}_4$.

La comparación de las gráficas I y II nos permite plantear, que para los valores de x , el tratamiento térmico adicional no modifica sustancialmente el espectro M-O en la región de interés, ni debe ocurrir una redistribución catiónica en las subredes magnéticas, manteniendo una estructura espinela inversa.

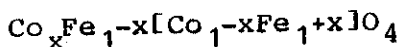
E de Grave y colaboradores^[1] han estudiado la coordinación de los iones de Co^{2+} para $x < 0.04$, mediante espectrometría Mossbauer, resultando por los iones Co^{2+} están situados en los sitios octaédricos, permaneciendo invariable la estructura espinela inversa al variar el contenido de Co.

También mediante la técnica de magnetometría vibracional^[7] se ha comprobado que para muestras $x = 0.05$ y 0.1 que sufrieron un tratamiento térmico similar al nuestro, no se produjo una redistribución catiónica.

RESULTADOS CON LA ESPECTROMETRÍA MOSSBAUER

En la Figura (III) aparece el espectro Mossbauer obtenido para la muestra $x = 1$ sometido a un tratamiento térmico a una temperatura de 1400°C durante dos horas y utilizando el programa REM (Resolución de Espectros Mossbauer) que permite además del cálculo de los parámetros hiperfinos, conocer el área relativa de los subespectros. Este parámetro es precisamente el que nos permitirá calcular la distribución catiónica ya que el área correspondiente a un sitio cristalográfico es proporcional al número de núcleos resonantes en él.

Para una estructura espinela no completamente inversa, la distribución catiónica en las subredes magnéticas viene expresado por:



donde x es el parámetro de inversión.

Entonces la relación entre las áreas correspondientes a los sitios octaédricos (B) y tetraédricos (A) vendrá dada por:

$$A'_B / A'_A = (1+x) / (1-x)$$

Como resultado del ajuste realizado mediante el programa de computación relacionamos los siguientes parámetros para ambos sextetos: campo magnético hiperfino (HI), interacción cuadripolar (QS), corrimiento isomérico (respecto al Fe, (IS)), área parcial (A').

sexteto No. 1 (A)

$$\text{HI} = 520 + 0,02 \text{ KDe}$$

$$\text{QS} = 0,04 + 0,02 \text{ mm/s}$$

$$\text{IS} = 0,31 + 0,02 \text{ mm/s}$$

$$A' = 25 + 6 \%$$

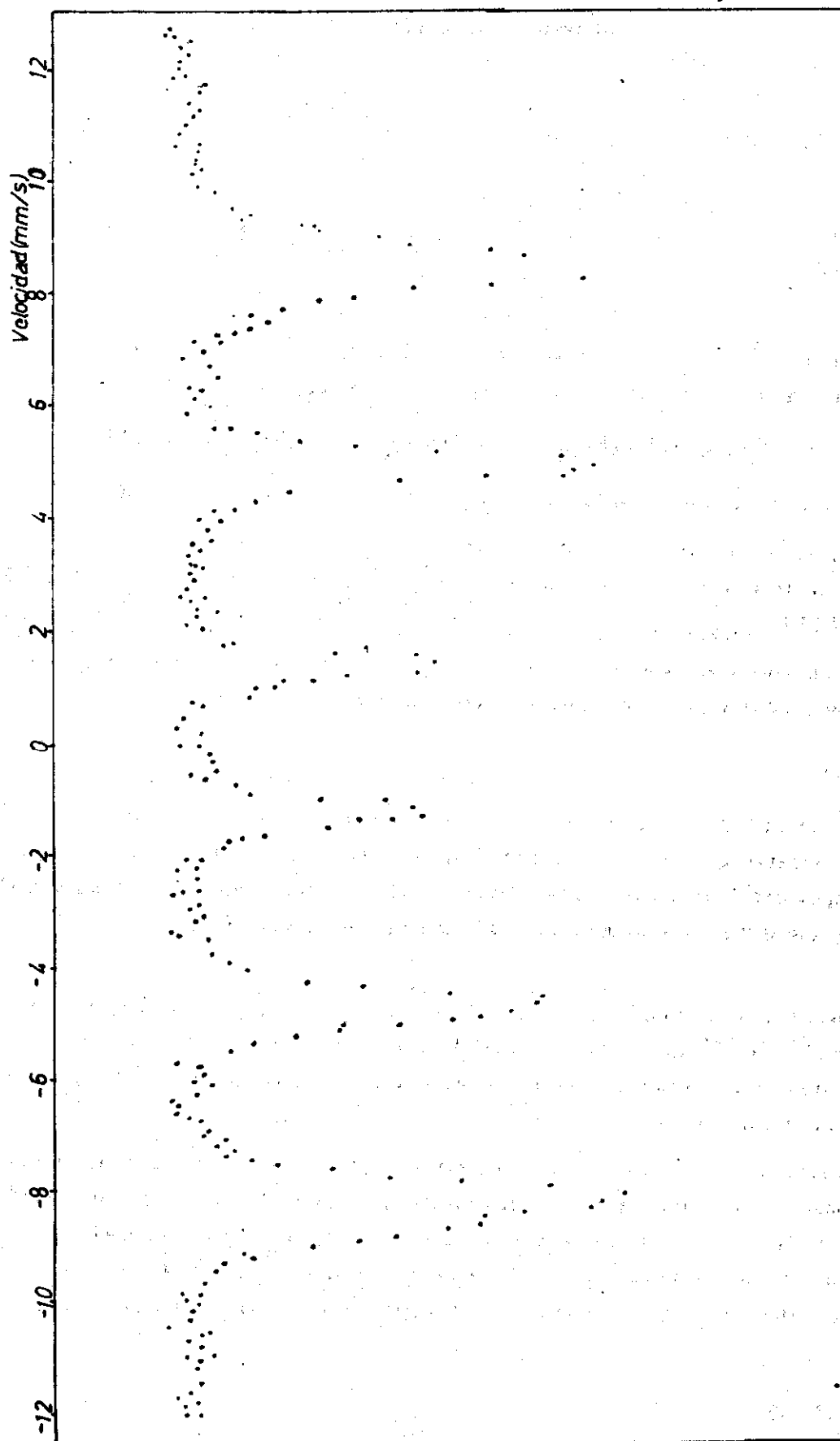


Figura 3. Espectro Mossbauer para la muestra CoFe_2O_4 tratada térmicamente durante 4 horas a la temperatura de 1000°C .

sexteto No. 2 (B)

$$HI = 493 + 2 \text{ KDe}$$

$$QS = 0 + 0,01 \text{ mm/s}$$

$$IS = 0,23 + 0,01 \text{ mm/s}$$

$$A^* = 75 + 7 \%$$

Estos valores obtenidos concuerdan con los reportados por la literatura^[10].

Lo anterior nos permitió conocer el parámetro de inversión y obtener para la ferrita de CoFe_2O_4 la siguiente distribución catiónica:



Este resultado permite afirmar que todo el cobalto no está en los sitios octaédricos, que tiene lugar una migración del ión Co^{2+} de los sitios octaédricos a los sitios tetraédricos lo que concuerda con Peeter, Martens y Van Noort^[11], cuyas muestras fueron enfriadas bruscamente a diferencia de las utilizadas por nosotros que fueron enfriadas lentamente pero no recibieron un tratamiento térmico adicional obteniendo resultados similares.

CONCLUSIONES

Como resultado de este trabajo se completa el ciclo de investigaciones del efecto ecuatorial de Keer para $0 < x < 1$ comprobándose que para valores de $x < 0,1$ el espectro obtenido es semejante al de la magnetita y para valores de $x > 0,1$ el espectro es semejante al de la espinela de Co.

La transición observada en 1.5 eV se explica para la transferencia de carga del $\text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Fe}^{3+}$ en sitios octaédricos y se comprobó que la intensidad del pico aumenta significativamente con la disminución del contenido de cobalto.

El tratamiento térmico adicional realizado a las muestras no modifica sustancialmente la forma del espectro M-O, especialmente en la región de interés, por lo que no debe ocurrir una redistribución catiónica, manteniendo su estructura espinela inversa para valores de $x = 0.06, 0.07$ y 0.08 , algo que no ocurre para $x = 1$ comprobado por espectrometría Mossbauer.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos el asesoramiento brindado por la compañera Lic. Irina Guerasimenco en la preparación química de los polvos. A los compañeros Lic. Sergio García y Lic. Nelson Suárez por los trabajos de espectrometría Mossbauer y al técnico Arnoldo Radillo en el pulido de las superficies.

REFERENCIAS

1. DE GRAVE, E., R. LEYMAN and R. VANLEERBERGHE (1983): Phys. Letters, 97-A(8).
2. MARTENS, J.W.D., W.L. PEETERS (1982): Sol. State. Comm., 41(9): 667.
3. SAWATZKY, G.A., F. VAN DER WOUDE and A.A. MORRISH (1969): J. Appl., 39(2).
4. KHEBTOV, A.P., A.A. SCOCHENSKII, E.M. SPERANSKAYA, R.H. TURKMENOV (1979): Bull. Acad. Sci., URSS, Phys. Ser., 42, 73.
5. MARTENS, J.W.D. (1985): Phillips Research Laboratories.
6. FUENTES, L., E.G. TARAJANO and K. WALTHER (1985): Joint Institute for Nuclear Research.
7. TARAJANO, E.G., A. DE LA CAMPA, E. GANSHINA [inédito]: Rev. Cubana de Física.
8. TARAJANO, E.G., E.A. GANSHINA, V.D. LISKOV (1986): Rev. Cubana de Fís., 6(3): 83.
9. SIMSA, Z., P. SIROKY, P. CJECH (1980): J. Phys. B, 30, p. 957.
10. EVANS, B.J.: Mossbauer Effect Metodology, vol. 4.
11. MARTENS, J.W.D., W.L. PEETERS, H.M.J. VAN NOORT (1985): Phys. Chem. Solids, 46(4): 411.

ONDAS PLANAS DE AMPLITUD VARIABLE EN LIQUIDOS GIRATORIOS COMPRESIBLES. PROBLEMA DE AUTOVALORES

José Marín Antuña, Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana.

RESUMEN

En este artículo se continúan las investigaciones referidas a los procesos oscilatorios en líquidos giratorios y compresibles. Se estudian las relaciones de dispersión de las ondas planas en el líquido y se analiza el problema de autovalores que surge como consecuencia de la propagación de una onda plana de amplitud variable a lo largo de una guía de ondas planas de paredes rígidas sumergida en el líquido. Se ofrecen los resultados en forma analítica y se hace un análisis breve de los mismos.

ABSTRACT

In this paper the research of oscillations in a giratory compressible liquid is continued. We study dispersion relations of plane waves in the liquid and we analyze the eigenvalue problem, which appears like a consequence of the propagation of a plane wave with variable amplitude in a plane wave guide of rigid wall in the liquid. We give the analitic form of the results and analyze briefly.

INTRODUCCIÓN

En el estudio de los modelos asociados a la propagación de ondas en líquidos giratorios y compresibles que venimos efectuando en varios trabajos [1, 2, 3] tiene indudable importancia la investigación de las relaciones de dispersión en tal líquido y el problema de autovalores que se produce como resultado del análisis de la propagación de ondas planas de amplitud variable en una guía de ondas planas de paredes rígidas sumergida en el líquido mencionado. Los resultados que a continuación se exponen han sido obtenidos como consecuencia de dicha investigación.

1. RELACIONES DE DISPERSIÓN

Analicemos un líquido giratorio y compresible que gira con velocidad angular $\alpha/2$ alrededor de un eje vertical. Referiremos los movimientos bidimensionales del líquido al sistema de coordenadas cartesianas (x_1, x_3) con eje Ox_3 en la dirección del vector $\vec{\alpha}$. En este caso [1] la ecuación que describe las oscilaciones pequeñas (la velocidad del sonido es considerada igual a uno) es:

$$L[u] = \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla_2^2 u + \alpha^2 u \right] - \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x_3^2} = 0, \quad (1)$$

donde $u(x_1, x_3, t)$ tiene el sentido físico de la presión dinámica del líquido o de las componentes del vector de velocidades de las partículas del líquido y

$$\nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}$$

Supongamos que en el líquido se mueve una onda del tipo

$$u(x_1, x_3, t) = u_0(x_3) e^{i(k_1 x_1 - \gamma t)}, \quad \gamma > \alpha \quad (2)$$

donde k_1 es el número de onda en la dirección Ox_1 y γ es la frecuencia de la onda. La condición $\gamma > \alpha$ es indispensable para garantizar la propagación de la onda en la dirección Ox_1 [2]. En otras palabras, supongamos que en el líquido a lo largo del eje Ox_1 se mueve una onda plana armónica con amplitud $u_0(x_3)$ que depende de la coordenada x_3 . La ecuación (1) nos permite hallar para la amplitud $u_0(x_3)$ la expresión:

$$(\gamma^2 - \alpha^2) u_0 + \gamma^2 (\gamma^2 - \alpha^2 - k_1^2) u_0 = 0, \quad (3)$$

cuyas soluciones linealmente independientes son:

$$u_{01}(x_3) = e^{i\gamma x_3 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma^2 - \alpha^2}}}, \quad u_{02}(x_3) = e^{-i\gamma x_3 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma^2 - \alpha^2}}} \quad (4)$$

Un análisis nos permite afirmar que en el caso en que

$$-\sqrt{\gamma^2 - \alpha^2} < k_1 < \sqrt{\gamma^2 - \alpha^2} \quad (5)$$

la expresión (4) de las amplitudes de la onda (2) son magnitudes acotadas oscilantes. Este es el caso de mayor interés físico; el caso

$|k_1| > \sqrt{\gamma^2 - \alpha^2}$ da amplitudes exponenciales reales, y aunque matemáticamente son posibles no tienen interés desde el punto de vista físico por no dar ondas que se propaguen y no lo consideraremos en lo adelante.

Por consiguiente tendremos

$$u_0(x_3) = e^{\pm i k_3 x_3} \quad (6)$$

donde

$$k_3 = \gamma \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma^2 - \alpha^2}} \quad (7)$$

es el número de onda en la dirección Ox_3 . De (7) es fácil obtener

$$\gamma^2(\gamma^2 - \alpha^2) - \gamma^2 k^2 + \alpha^2 k^2 \cos^2 \theta = 0 \quad (8)$$

donde $k^2 = k_1^2 + k_3^2$ y θ es el ángulo que forma el vector de onda $\vec{k}$ con el eje Ox_3 de rotación líquido.

La relación de dispersión (8) fue obtenida y analizada en [3]. Aquí nos dedicaremos al estudio de las características de la función de amplitud $u_0(x_3)$ cuando la onda (2) se propaga no en todo el espacio R^2 , sino en una franja dentro del líquido analizado.

2. PROBLEMA DE AUTOVALORES

Supongamos que en líquido descrito en el punto anterior se encuentran sumergidas dos placas rígidas infinitas, perpendiculares ambas al eje Ox_3 , a la distancia l entre sí y descritas por las ecuaciones $x_3 = 0$, $x_3 = l$. Estas placas conforman una guía de ondas bidimensionales en nuestro líquido.

Investigaremos la propagación de ondas del tipo (2) en dicha guía. En otras palabras, considerando que u tiene el sentido físico de la componente

en el eje Ox_3 del vector de velocidades de las partículas del líquido, el problema se reduce a hallar las soluciones de

$$\left\{ \begin{array}{l} u_0 + \gamma^2 \left[1 - \frac{k_1^2}{\gamma^2 - \alpha^2} \right] u_0 = 0 \quad \forall 0 < x_3 < 1, \gamma > \alpha, \\ u_0 \Big|_{x_3=0} = u_0 \Big|_{x_3=1} = 0, \end{array} \right. \quad (9)$$

bajo la condición de que se cumple (5). En este caso las autofunciones del problema (9) son

$$u_0_n(x_3) = \sin \left[\gamma_n x_3 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}} \right] \quad (10)$$

donde los autovalores son todos reales y vienen dados por la expresión:

$$\gamma_n = \pm \sqrt{\frac{1}{2} \left[\left(\frac{n\pi}{1} \right)^2 + \alpha^2 + k_1^2 \right] + \frac{1}{2} \sqrt{\left[\left(\frac{n\pi}{1} \right)^2 + \alpha^2 + k_1^2 \right]^2 - 4 \left(\frac{n\pi\alpha}{1} \right)^2}} \quad (11)$$

con $n = 1, 2, 3, \dots$. Nótese que para el líquido en reposo ($\alpha = 0$) la fórmula (11) da los autovalores conocidos del problema de frontera de la onda armónica (2) entre dos placas rígidas. Igualmente, en el límite para $k_1 \rightarrow 0$ (onda estacionaria) se obtiene que $\gamma_n = \left(\frac{n\pi}{1} \right)$ para toda α . Por otra parte, a medida que l crece el espectro de autovalores se va convirtiendo en continuo y en el límite para $l \rightarrow \infty$ se obtiene $\gamma^2 = \alpha^2 + k_1^2$.

La condición (5) teniendo en cuenta (11) nos permite afirmar que debe cumplirse que

$$\frac{1}{2} \left[\left(\frac{n\pi}{1} \right)^2 + \alpha^2 + k_1^2 \right] + \frac{1}{2} \sqrt{\left[\left(\frac{n\pi}{1} \right)^2 + \alpha^2 + k_1^2 \right]^2 - 4 \left(\frac{n\pi\alpha}{1} \right)^2} > \alpha^2 + k_1^2 \quad (12)$$

de donde concluimos que

$$\left(\frac{n\pi}{1} \right)^2 k_1^2 > 0 \quad (13)$$

que siempre se cumple para $n > 0$. Por consiguiente, en la guía de ondas analizadas se propagan todos los armónicos.

A partir de la solución obtenida y teniendo en cuenta la relación entre la presión dinámica y las componentes del vector de velocidades de las partículas del líquido [1, 2, 3], para estas magnitudes en la guía de onda se obtienen las siguientes expresiones:

$$p = \frac{ie^{i(k_1 x_1 - \gamma_n t)}}{\sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}}} \cos \left[\gamma_n x_3 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}} \right] + p_0 \quad (14)$$

$$v_{x_1} = -\frac{1}{ik_1} \frac{\gamma_n}{\sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}}} \left[2 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2} \right] e^{i(k_1 x_1 - \gamma_n t)} \cos \left[\gamma_n x_3 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}} \right] \quad (15)$$

$$v_{x_2} = \frac{\alpha}{k_1 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}}} \left[2 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2} \right] e^{i(k_1 x_1 - \gamma_n t)} \cos \left[\gamma_n x_3 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}} \right] \quad (16)$$

$$v_{x_3} = e^{i(k_1 x_1 - \gamma_n t)} \sin \left[\gamma_n x_3 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}} \right] \quad (17)$$

donde p_0 tiene el sentido físico del valor no perturbado de la presión en el líquido.

3. ONDAS ESTABILIZADAS

Por último, hagamos notar que las amplitudes de la componente x_3 del vector de velocidades de las partículas del líquido satisfacen la ecuación de las ondas estabilizadas.

$$\gamma v_{x_1 x_1} + (\gamma^2 - \alpha^2) v_{x_3 x_3} + \gamma^2 (\gamma^2 - \alpha^2) v = 0 \quad (18)$$

que se obtiene de (1) mediante la operación

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{-i\gamma t} L \left[e^{i\gamma t} v \right]$$

que siempre se cumple para $n > 0$. Por consiguiente, en la guía de ondas analizadas se propagan todos los armónicos.

A partir de la solución obtenida y teniendo en cuenta la relación entre la presión dinámica y las componentes del vector de velocidades de las partículas del líquido [1, 2, 3], para estas magnitudes en la guía de onda se obtienen las siguientes expresiones:

$$p = \frac{ie^{i(k_1 x_1 - \gamma_n t)}}{\sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}}} \cos \left[\gamma_n x_3 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}} \right] + p_0 \quad (14)$$

$$v_{x_1} = -\frac{1}{ik_1} \frac{\gamma_n}{\sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}}} \left[2 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2} \right] e^{i(k_1 x_1 - \gamma_n t)} \cos \left[\gamma_n x_3 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}} \right] \quad (15)$$

$$v_{x_2} = \frac{\alpha}{k_1 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}}} \left[2 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2} \right] e^{i(k_1 x_1 - \gamma_n t)} \cos \left[\gamma_n x_3 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}} \right] \quad (16)$$

$$v_{x_3} = e^{i(k_1 x_1 - \gamma_n t)} \sin \left[\gamma_n x_3 \sqrt{1 - \frac{k_1^2}{\gamma_n^2 - \alpha^2}} \right] \quad (17)$$

donde p_0 tiene el sentido físico del valor no perturbado de la presión en el líquido.

3. ONDAS ESTABILIZADAS

Por último, hagamos notar que las amplitudes de la componente x_3 del vector de velocidades de las partículas del líquido satisfacen la ecuación de las ondas estabilizadas.

$$\gamma v_{x_1 x_1} + (\gamma^2 - \alpha^2) v_{x_3 x_3} + \gamma^2 (\gamma^2 - \alpha^2) v = 0 \quad (18)$$

que se obtiene de (1) mediante la operación

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{-i\gamma t} L \left[e^{i\gamma t} v \right]$$

La ecuación (18) para el caso $\gamma > \alpha$ que nos ocupa en las dos primeras secciones del presente artículo, es una ecuación de tipo elíptico cuyas soluciones son ondas que se propagan en todas las direcciones del espacio R^2 , lo que está en plena concordancia con la teoría conocida de las ecuaciones elípticas de Helmholtz. Sin embargo, para el caso $\gamma < \alpha$, la ecuación (18) es una ecuación hiperbólica (del tipo de Klein-Gordon), cuyo estudio sistemático ha sido comenzado recientemente [6 - 9]. Las características de la ecuación (18) son las rectas.

$$x_3 \pm \frac{\sqrt{\alpha^2 - \gamma^2}}{\gamma} x_1 = 0 \quad (19)$$

las cuales definen el cono característico

$$|x_3| > \frac{\sqrt{\alpha^2 - \gamma^2}}{\gamma} |x_1| \quad (20)$$

dentro del cual las ondas se propagan, en tanto que fuera de dicho cono tienen el carácter de ondas estacionarias que se amortiguan para

$$\sqrt{x_1^2 + x_3^2} \longrightarrow \infty.$$

REFERENCIAS

1. MARIN ANTUÑA, J. (1984): "Sobre una ecuación para ondas bidimensionales en un líquido giratorio y compresible", Revista Cubana de Física, IV(3): 63-75.
2. ----- (1985): "Sobre la excitación de ondas en un líquido giratorio y compresible", Revista de Ciencias Matemáticas, VI(1): 105-114.
3. ----- (1987): "Ondas planas y relaciones de dispersión en líquidos giratorios y compresibles", Revista Cubana de Física, VII(1).
4. TIJONOV, A.N.; A.A. SAMARSKY (1977): "Ecuaciones de la Física Matemática", Nauka, Moscú.
5. MADELUNG, E. (1957): El Aparato Matemático de la Física, Berlín.
6. GABOV, S.A. (1982): Difracción de ondas internas descritas por la ecuación de Klein-Gordon en un semiplano, Doklady Akad CCCP, T. 264, No. 73-75.
7. ----- (1982): Sobre un problema de difracción de ondas descritas por la ecuación de Klein-Gordon, Zhurnal Vichis. mat. y matem. fiziki, T. 22, No. 6, 1518.
8. GABOV, S.A.; A.G. SVIESHNIKOV; A.K. SHATOV (1983): Dispersión de ondas descritas por la ecuación de Klein-Gordon por un plano indicado, Doklady Akad. Nauk CCCP, T. 268, No. 5, 1098.
9. MARIN ANTUÑA, J. (1985): Disertación para la obtención del grado científico de candidato en ciencias físico-matemáticas, Facultad de Física, Universidad Estatal de Moscú.

LA EXPANSION LIBRE DE UNA DISTRIBUCION ESFERICA DE PARTICULAS COMO UN PROBLEMA DE DOS CUERPOS

M.A.H. García Díaz, Departamento de Física, I.S.P.E.T.P.

RESUMEN

Se estudia la expansión libre de una distribución esférica de partículas que, según el caso, interactúan gravitacional o eléctricamente. El procedimiento empleado, consistente en dividir virtualmente al sistema en dos hemisferios, simplifica el planteamiento a un problema de dos cuerpos. Esto permite describir analíticamente el movimiento expansivo y, a su vez, contribuye a establecer como una ley de la inversa del cuadrado de la distancia, las fuerzas atractivas o repulsivas que los hemisferios ejercen entre sí.

ABSTRACT

Free expansion in a spherical distribution of particles is studied. Gravitational or electrical field in the system is considered. The applied procedure simplifies the question to a two-body problem, since the system is virtually divided in two hemispheres. This allows the analytical description of the expansive motion and, in turn, it contributes to found, as an inverse-square law, the attractive or repulsive forces exerted between the hemispheres.

INTRODUCCIÓN

Las investigaciones realizadas en torno al problema del movimiento de N cuerpos -que se atraen o se repelen según la ley de la inversa del cuadrado de la distancia- se clasifican /1/ en dos grandes grupos. Uno, que ha tratado de resolver el problema analítico y otro, que a falta de una solución analítica satisfactoria se contenta con obtener resultados numéricos aceptables. Es incalculable el número de modalidades en que puede aparecer el famoso problema. Una de ellas lo constituye el movimiento de expansión de un sistema de partículas -idénticas por sus propiedades físicas- que presenta simetría esférica, o sea, una esfera de gas, de cuyo estudio por primera vez se ocupó Emden /2/. Si este gas es ideal se admite que el campo macroscópico asociado a las cargas de las partículas no afecta sus propiedades /3/. Cuando dicho campo de fuerzas puede despreciarse el problema se simplifica notoriamente, y su solución /4/ se halla mediante la división virtual del sistema en dos subsistemas, en forma de hemisferios. La idea de este procedimiento no es nueva, aunque su explotación ha sido insuficiente. En su forma más elemental Newton lo emplea en su Principia Mathematica /5/ para apoyar la validez de la última de las tres célebres leyes de su mecánica, pero su verdadero origen se remonta a los tiempos en que Arquímedes estudiaba el centro de gravedad de los cuerpos rígidos /6/, y su complejidad se acrecienta cuando se pretenden formular las fuerzas de interacción de los subsistemas. Así, al considerar la fuerza de atracción (si el campo macroscópico es de carácter gravitacional) o de repulsión (si es de carácter eléctrico) entre los subsistemas de una distribución esférica de partículas, surge un gran inconveniente: se desconoce el aspecto cuantitativo de las respectivas leyes de interacción, es decir, nada se sabe de las expresiones analíticas que les corresponden. De hecho hay que olvidarse en deducirla directamente, porque, como algunos expresan /7/, la tarea de calcular la fuerza gravitacional entre masas extendidas (válido para las cargas eléctricas) es matemáticamente tan complicada que sólo en muy contados casos se logra el resultado final; pese a que últimamente, aplicando el concepto de masa negativa /8/, se ha incrementado su número. No obstante, como se comprenderá, esta vía es, por su propia índole, incapaz de dar la respuesta que se requiere. Ante esta situación hay que optar por la siguiente alternativa: asumir, por razones de simetría y dimensionalidad, que las fuerzas atractivas -o repulsivas, según el caso- entre los hemisferios se rige por una expresión formalmente análoga a la de la Ley de la Gravitación Universal de Newton. Luego esta hipótesis se pone a prueba haciendo que, en vez de objetivo, el problema fundamental de la mecánica se convierta en medio de precisar la expresión supuesta. Sin embargo, este papel poco usual que desempeña el problema fundamental de la mecánica no es óbice para que, a renglón seguido, se arribe a la ecuación del movimiento de expansión del sistema. Para ello,

como en /4/, se admitirá que la distribución espacial de las partículas, en cualquier instante, es uniforme; con lo cual no sólo se gana en sencillez, sino que, además, se garantiza la estabilidad de las formas matemáticas de las leyes de interacción durante la expansión.

CASO GRAVITACIONAL

1. Método Energético.

Imaginemos una distribución esférica de partículas, de radio R , como un gas ideal monoatómico no degenerado y consideremos la presencia del campo gravitacional asociado a la masa M del mismo; cuya energía interna, a fin de asegurar su expansión libre ilimitada, convendremos que no es negativa, mientras su densidad de masa es uniforme. Seleccionemos el sistema inercial de referencia (S.I.R.) con su origen, O , en el centro de masa (C.M.) de la esfera gaseosa (ver Figura). Supongamos que a partir del estado inicial ($R = R_0$) el sistema se expande, manteniéndose uniforme su densidad de masa. La energía interna del sistema viene dada por

$$E = M\bar{V}_0^2 / 2 - 3GM^2 / 5R_0 \quad (1)$$

donde $\sqrt{\bar{V}_0^2}$ es la velocidad cuadrática media cuando $R = R_0$, y G la constante de gravitación universal. Fijemos la atención en los subsistemas, de forma hemisférica, en que el plano YZ divide al gas. Sobre cada subsistema actuará, como consecuencia de la transferencia de momento lineal entre los mismos /4/, la fuerza de intercambio

$$F = \bar{V}^2 / 4R \quad (2)$$

donde $\sqrt{\bar{V}^2}$ es la velocidad cuadrática media del movimiento caótico de las partículas cuando el radio de la distribución es R . Además, actuará la fuerza atractiva F' que la masa, $M/2$, del subsistema contiguo ejerce sobre la masa, $M/2$, del subsistema objeto de estudio; y, como el eje X coincide con las directrices de F y F' , en todo momento, prescindiremos de la notación vectorial. Si S es la distancia entre los C.M. de los subsistemas, asumiremos que los dos hemisferios se atraen como si sus masas estuvieran concentradas en sus respectivos centros de masa. En términos matemáticos

$$F' = H \cdot \left[\frac{M}{2} \right] \cdot \left[\frac{M}{2} \right] / S^2$$

siendo H el coeficiente de proporcionalidad, con las mismas dimensiones que G , pero cuyo valor no es desconocido. Por conveniencia estableceremos la siguiente relación: $H = KG$, donde K es una constante a determinar. De esta manera

$$F' = K \left[G \cdot \left[\frac{M}{2} \right] \cdot \left[\frac{M}{2} \right] / S^2 \right] \quad (3)$$

de modo que la energía potencial gravitacional de los subsistemas, U' , obviamente, es

$$U' = -K \left[G \cdot \left(\frac{M}{2} \right) \cdot \left(\frac{M}{2} \right) / S \right] \quad (4)$$

en tanto la energía potencial, U , asociada a las fuerzas de intercambio, como ya se demostró /4/, viene dada por

$$U = (15/128) \bar{M} \bar{V}_0^2 \cdot (R_0/R)^{8/5} \quad (5)$$

Ahora bien, como la energía total de interacción de los subsistemas es, indefectiblemente, una fracción de la energía interna, la ley de conservación de la energía mecánica permite escribir

$$U + U' + MU^2 / 2 = \alpha E \quad (6)$$

donde, por lo dicho, α representa a un factor numérico positivo e inferior a la unidad; en tanto $u = 3V_R/8$ (7) denota el valor de la velocidad de los C.M. de ambos subsistemas, mientras V_R es la velocidad de la superficie exterior del sistema. Ya que $S = 3R/4$ (8) y para $R = R_0$ se tiene que $u = 0$, de (6), y teniendo en cuenta (4) y (5), resulta

$$(15/128) \bar{M} \bar{V}_0^2 - KGM^2/3R_0 = \alpha E$$

Sustituyendo, con el auxilio de (1), queda

$$\left(\frac{15}{64} - \alpha \right) E + \left(\frac{9}{64} - \frac{K}{3} \right) \cdot \frac{GM^2}{R_0} = 0$$

Haciendo $E = 0$ se tiene $K = 27/64$ (9), y como la expresión anterior es válida cuando $E > 0$, se tiene $\alpha = 15/64$ (10). Así, si volvemos a (6) y sustituimos con arreglo a (4), (5), (7), (8), (9) y (10), resulta

$$V_R = \left\{ \frac{5}{3} \bar{V}_0^2 \left[1 - (R_0/R)^{8/5} \right] + 2GM \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{R_0} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (11)$$

de modo que

$$V_{R_{\max}} = \lim_{R \rightarrow \infty} V_R = \left[\frac{5}{3} \bar{V}_0^2 - \frac{2GM}{R_0} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (12)$$

y como la energía cinética de expansión /4/ viene dada por

$$E' = 3MV_R^2 / 10 \quad (13)$$

su valor máximo, de acuerdo con (12) y (1), es $E'_{\max} = E$ (14)

II. Estado Estacionario.

Considerando que la energía potencial total de interacción de los subsistemas viene dada por $E_{pi} = U + U'$ (15), desde el punto de vista energético, el sistema se encuentra en estado estacionario cuando E_{pi} sea un mínimo. Luego, derivando en (15) con respecto a S y teniendo en cuenta (2), (3), (4), (5) y (8) resulta que $F = F'$. Ahora, según (2), (3), (8) y (9), tenemos $E_{co}/E_{po} = -5/8$ (16), donde $E_{co} = MV_0^2/2$ y $E_{po} = 3GM/5R_0$. De (1) se sigue que $E = -9GM/40R_0$. (17)

CASO ELÉCTRICO

Consideremos una distribución esférica de partículas que tienen la misma carga eléctrica y la misma masa -despreciable por su acción gravitacional- de modo que, si inicialmente las partículas están en reposo, la energía interna del sistema es $E = 3kQ^2 / 5R_0$ (18), donde k es el coeficiente de proporcionalidad de la ley de Coulomb, Q es la carga del sistema y R_0 su radio inicial. Si en cierto instante las partículas electrizadas se liberan, dada la simetría del sistema, se moverán radialmente, produciéndose la expansión. Sea esta libre y V_R -cuyo valor depende de E - relativamente pequeña, a fin de despreciar los efectos relativistas. Empleando el procedimiento de los subsistemas y admitiendo que la densidad de carga γ , por consiguiente, la densidad de masa se mantiene uniforme, la fuerza repulsiva entre los subsistemas puede ser escrita de la manera siguiente

$$F_e = Ck (Q/2) (Q/2) / s^2 \quad (19)$$

donde C es una constante adimensional. Desde el S.I.R., cuyo origen nuevamente coincide con el C.M. del sistema, tenemos $F_e = (M/2) du/dt$.

Integrando, después de sustituir según (19), (7) y (8), podemos escribir

$$V_{R \max}^2 = 128 CkQ^2 / 27 MR_0$$

y sustituyendo en (13) queda

$$E'_{\max} = 64 CkQ^2 / 45 R_0 \quad (20)$$

Por otra parte, como la relación carga-masa es la misma para todas las partículas, dada la simetría del sistema, durante la expansión éste no radia /9/; por lo cual $E'_{\max} = E$. Sustituyendo en la igualdad anterior, con arreglo a (18) y (20), resulta $C = 27/64$.

DISCUSIÓN

Si el campo gravitacional del sistema de partículas neutras es

despreciable, entonces, como caso particular /4/, la ecuación V_R se reduce al primer término, entre llaves, del miembro derecho de (11). En cambio, si $\bar{V}_0^2 = 0$, V_R viene dada por el segundo término, entre llaves, del miembro derecho de (11); aunque para que tenga sentido físico debe cumplirse que $R \leq R_0$. Esto significa que la distribución esférica de partículas, inicialmente estáticas, se contrae, transformando progresivamente la energía potencial gravitacional en energía cinética. Prueba de ello es que, con el auxilio de (13) y la fórmula de la energía potencial gravitacional de la esfera de densidad de masa uniforme, la ley de conservación de la energía mecánica conduce también, en este caso, a la ecuación de V_R . Adviértase que el resultado expresado analíticamente en (14) es, en rigor, consecuente con dicha ley, y (10) implica que la energía total de interacción de los subsistemas es, aproximadamente, igual a la cuarta parte de la energía interna del sistema; cuya cota inferior, a partir de la cual se expande, la da (17). Obviamente, (17) proporciona la energía interna del sistema en el estado estacionario, para el cual es válida la relación (16). Esta, a diferencia del resultado que proporciona el teorema del virial -el cual ha desempeñado un destacado papel en la astrofísica /10/ por haber sido la única forma aproximada de relacionar la energía del movimiento térmico y la energía potencial gravitacional del sistema- se establece a través de una derivación que descansa exclusivamente en las leyes de la mecánica clásica.

Por otra parte, el método dinámico resulta ineficaz para deducir (11), lo cual muestra la conveniencia en definir (4) y (5) para abordar, mediante el método energético, la descripción matemática del movimiento de los C.M. de los subsistemas. El hecho de que $k \neq 1$ implica que H y G son dos coeficientes de proporcionalidad numéricamente diferentes. Esto debe constituir motivo de alarma, ni nadie puede ver en ello una violación de la Ley de la Gravitación Universal de Newton similar a la que algunos infieren del experimento del geofísico Stacey /11/, lo cual ha dado pie a una tremenda polémica. Aquí la cuestión es más sencilla. La atracción gravitacional entre dos puntos materiales está, siempre, regida por una ley de la inversa del cuadrado de la distancia; pero cuando la distancia de separación no se puede despreciar en comparación con las dimensiones de los cuerpos que ellos representan, entonces, se requiere especificar su forma: si son esferas la constante de gravitación es G , mientras que si son los hemisferios de una de éstas, de densidad de masa uniforme, entonces, es H .

El caso eléctrico da para C el valor que aparece en (9), como constancia de que la analogía formal entre las interacciones gravitacionales y eléctricas mantiene su vigencia. Una última observación. Es oportuno aclarar que si bien las partículas elementales electrizadas, en reposo, presentan

un campo con simetría esférica, por más de una razón, no se puede garantizar el rango de validez de (19) a las mismas. De esta manera, si es que tiene sentido, sigue en pie el controvertible problema de la fuerza de repulsión entre las partes del electrón /12/.

CONCLUSIONES

Los resultados de mayor significación son:

1. La determinación de la constante adimensional que relaciona los coeficientes de proporcionalidad de las leyes de la inversa del cuadrado de la distancia, de Newton y de Coulomb, con las que rigen las interacciones gravitacionales o eléctricas de los hemisferios en que se subdivide, virtualmente, la distribución esférica de partículas.
2. La solución analítica de la ley del movimiento como un problema de dos cuerpos, de donde se deducen, de un lado, el caso particular en que el campo gravitacional del sistema es despreciable y, del otro, aquel en que las partículas neutras están inicialmente en reposo; siendo éste de especial interés, por cuanto la ecuación del movimiento de contracción puede derivarse por otro procedimiento: mediante consideraciones energéticas que engloben a todo el sistema.
3. La deducción de la relación entre la energía del movimiento térmico y la energía potencial gravitacional de la distribución en el estado estacionario, la cual, en orden de magnitud, coincide con el estimado estadístico del teorema del virial.

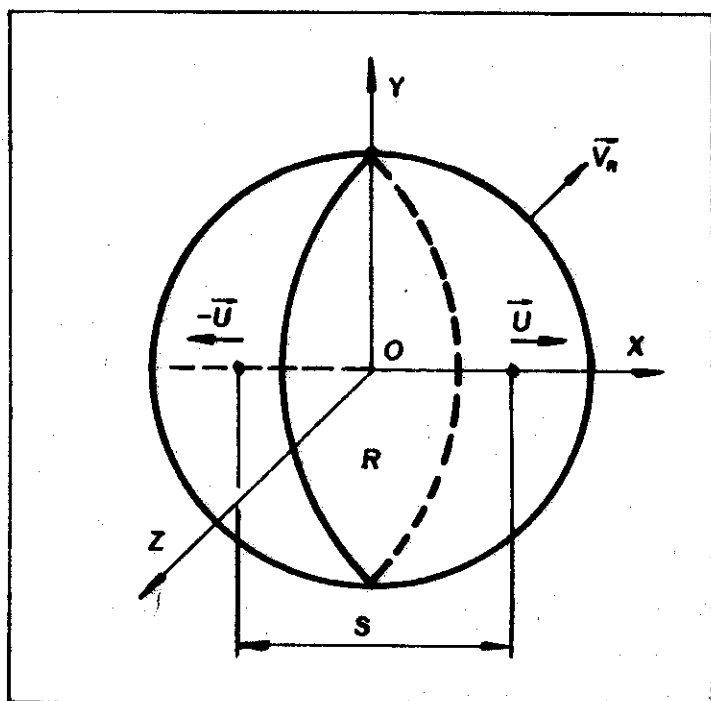


Figura 1. Sistema de partículas en expansión.

REFERENCIAS

1. INIGUEZ, J.M. y R. CID (1965): Mecánica Teórica, vol. 2, Edit. Dossat, Madrid, p. 317.
2. CAMPUSANO, L.E. (1982): Astrofísica Estelar: de 1 900 al Sputnik I, Edit. Universitaria, Stgo. de Chile, p. 50-55.
3. LYSIKOV, Iu I. (1981): Appl. Math. Mech., 45(6).
4. GARCÍA, M.A.H. (1985): Revista Cubana de Física, V(1).
5. PAPP, D. (1961): Historia de la Física, Edit. Espasa-Calpe, Madrid, p. 134.
6. VAILATI, J. (1947): Contribución a la Historia de la Mecánica, Edit. Espasa-Calpe, Buenos Aires, p. 127-33.
7. SAVÉLIEV, I.V. (1984): Curso de Física General, vol. 1, Mir, Moscú, p. 178.
8. STARJINSKI, V.M. (1986): Mecánica Teórica, Mir., Moscú. p. 153.
9. LANDAU, L.D. and E.M. LIFSHITZ (1962): The Classical Theory of Fields, 2 ed., Add.-Wesley, U.S.A., p. 215-7.
10. PEIMBERT, M. (1984): Temas Selectos de Astrofísica, U.N.A.M., México, p. 49-51.
11. RAÑADA, A. (1988): Revista Española de Física, 2(3).
12. FEYMANN, R.P., R.B. LEIGHTON and M. SANDS (1964): The Feymann Lectures on Physics, vol. 2, U.S.A., p. 1-1, 1-2.

CALCULO DE LA CARGA MEDIA DE IONES PESADOS EN MEDIOS GASEOSOS

Jorge M. Rigol Pérez,

RESUMEN

En este trabajo se calcula la carga media de iones pesados (Sn, Ta, U, Fm) al atravesar un medio gaseoso (O, Ar, Kr) diluido. Con este fin se utiliza el modelo de Bell, que asume una distribución de Tomas-Fermi para los electrones en el átomo. Los resultados se comparan con los datos experimentales.

ABSTRACT

The mean charge of heavy ions (Sn, Ta, U, Fm) during their travelling through a dilute gas (O, Ar, Kr) are calculated. The Bell's model is used which assume a Tomas-Fermi distribution for the electrons in the atom. The results are compared with the experimental ones.

INTRODUCCIÓN

En los últimos años, y en parte debido a la creación de nuevos separadores llenos con gas que se dedican a las investigaciones con iones pesados [1, 2, 3, 4], ha aumentado el interés y la necesidad de conocer la carga media de iones pesados al atravesar medios gaseosos diluido (≈ 100 Pa). En un amplio resumen sobre esta temática, realizado por Betz [5], se comparan los distintos métodos utilizados para el cálculo de la carga media de los iones moviéndose en un medio gaseoso.

Dada la complejidad de este proceso es necesario acudir a modelos simplificados como los de Bohr [6], Lamb [7], Knipp y Teller [8], Bell [9], o bien a fórmulas semiempíricas como las obtenidas por Dimitriev y Nikolaev [10]. El modelo de Bell, distinto a los demás, tiene en cuenta el tipo de gas por el que se desplaza el ión. Sin embargo, este modelo quedó en el olvido durante largos años, quizás, por ser demasiado laborioso. Como los resultados experimentales confirman [11] una fuerte dependencia de la carga media del ión con el tipo de gas, se justifica el estudio de las posibilidades del modelo de Bell aplicado a iones más pesados y con menores energías que los obtenidos en el proceso de fisión.

MODELO DE BELL

De acuerdo con este modelo [9], el valor de la carga (q) de un ión corresponderá al valor de la carga media $\langle q \rangle$, si para un valor dado de la velocidad del ión, la sección transversal de captura de un electrón por el mismo es igual a la sección transversal de pérdida de un electrón.

Según este modelo, para calcular la sección transversal de captura de un electrón asociado a un átomo del gas por parte del ión que se desplaza con carga (q) y velocidad v , se integra la expresión:

$$(1) \quad \sigma_c(q, v) = \pi \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} r_0^2(r) D(r) dr \int_{v_i}^{v_f} p(v_e) P(v, v_0, v_e) dv_e$$

donde v_e es la velocidad del electrón en el átomo del gas; $p(v_e)$ es la probabilidad de que el electrón tenga la velocidad v_e , calculada por el modelo de Tomas-Fermi; v_0 es la velocidad máxima que puede tener un electrón asociado al ión (se calcula por el modelo de Tomás-Fermi), $P(v, v_0, v_e)$, es un factor geométrico determinado por las condiciones:

$$(2) \quad P(v, v_0, v_e) = \begin{cases} 0 & \text{módulo } (v-v_e) \geq v_0 \\ 1 & \text{si } v + v_e \leq v_0 \\ [(v_0)^2 - (v-v_e)^2]/(4vv_e) & \text{si } v-v_e \leq v_0 \leq v+v_e \end{cases}$$

$D(r)dr$ es la probabilidad de encontrar el electrón en el átomo del gas entre r y $r + dr$ y $r_0(r)$ es la distancia electrón-ión tal que la fuerza de atracción del electrón por parte del ión es igual a la fuerza de atracción por parte del átomo del gas. Para calcular $r_0(r)$ es necesario tener en cuenta el apantallamiento del núcleo del átomo del gas, realizado por los

restantes electrones, lo cual calculamos utilizando la distribución de Tomas-Fermi.

Para calcular la sección transversal de pérdida de electrones se utiliza la conocida expresión para la dispersión de un electrón por un átomo:

$$(3) \quad d\sigma/d\Omega = [8m \pi^2 Z_{\text{eff}} e^2 / h^2]^2 / (\Delta p)^4$$

donde Z_{eff} es la carga efectiva del átomo del gas; m es la masa del electrón y Δp es el cambio de la cantidad de movimiento del electrón durante el choque.

Debe tenerse en cuenta que la carga del átomo de gas varía en la medida en que el ión se acerca al mismo. Esto implica que para calcular la carga efectiva del átomo hay que asumir determinado modelo. En nuestro caso, hemos seguido un camino un poco diferente al de Bell (ver [9]). Calculamos la distancia para la cual la función subintegrando de la expresión (4) muestra un máximo. Esta distancia corresponde a determinado valor del campo eléctrico. Entonces calculamos la distancia desde el núcleo del átomo de gas para la cual el campo creado toma el mismo valor que el obtenido antes. Al valor de la carga capaz de crear tal campo lo hemos considerado como la carga efectiva.

Teniendo en cuenta estas consideraciones, el valor de la sección transversal para la pérdida de un electrón por parte del ión con carga q y velocidad v se calcula de acuerdo con la expresión:

$$(4) \quad \sigma_L(p, v) = \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} D(r) dr \int_{\Omega_0} d\sigma(v, v_0, v_e) / d\Omega \cdot d\Omega$$

donde el ángulo sólido Ω_0 está determinado por factores geométricos (ver [9]) y v_0 se calcula a partir de los potenciales de ionización obtenidos por el método de Hartree-Fock en [12], $D(r)dr$ es la probabilidad de encontrar el electrón en el ión entre las distancias r y $r + dr$, lo cual se calcula mediante el modelo de Tomas-Fermi.

DETERMINACIÓN DE LA CARGA MEDIA

Después que se han calculado las secciones transversales de pérdida y captura de electrones por parte de un ión con carga q en dependencia de su velocidad, se determina el valor de la velocidad para el cual los valores de ambas secciones transversales coinciden. Este valor se pone, entonces, en correspondencia con el valor de la carga media $\langle q \rangle = q$.

Para ilustrar lo dicho, en la Figura 1 presentamos el cálculo de la carga media del ión tántalo-181, en argón. Los valores de σ_C y σ_L están

dados en unidades de πa_0^2 donde a_0 es el radio clásico del átomo de hidrógeno. Como se observa, los valores de la velocidad del ión para los cuales su carga media toma los valores 3, 5 y 7 serán 1.5, 1.9 y 2.6 respectivamente (la velocidad se expresa en unidades de v_0 que es igual a $2,19 \cdot 10^6$ m/s y que corresponde a la velocidad del electrón en el átomo de hidrógeno).

En la Tabla 1 se muestran los valores calculados para la velocidad de los iones de yodo, tántalo, uranio y fermio para los cuales su carga media toma los valores 3, 5 y 7 en los gases oxígeno, argón y kriptón.

COMPARACION CON LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES

En las Figuras 2 y 3 se comparan los valores calculados de la carga media del yodo y del tántalo en oxígeno con los datos experimentales tomados de [5] y [13]. En las Figuras 4-6 se comparan los resultados teóricos para iones de uranio en oxígeno, argón y kriptón con los resultados experimentales tomados de [13]. En el peor de los casos el valor teórico se diferencia del experimental en menos de un 25 %.

Debe tenerse presente que los criterios como los de Bohr [6] y Lamb [7] que no tienen en cuenta el tipo de gas, pueden arrojar resultados que se diferencien de los experimentales en un 30 - 40 % fundamentalmente para gases ligeros.

Además, en nuestros cálculos se observa una clara dependencia de la carga media con el tipo de gas, lo cual es un hecho establecido experimentalmente [11]. La determinación experimental de la carga media de un ión en un gas se realiza con una exactitud cercana al 5 % [13]. Si tenemos en cuenta que en nuestros cálculos no se utiliza ni un solo parámetro de ajuste o normalización se puede concluir que este modelo se puede utilizar para calcular la carga media de iones más pesados que los fragmentos de fisión y que se desplazan a menores velocidades.

CONCLUSIONES

El modelo propuesto originalmente por Bell para calcular la carga media, en gases, de los fragmentos de fisión con número atómico entre 40 y 50 y energías entre 80 y 100 Mev se ha empleado para el cálculo de la carga media de iones con número atómico hasta 100 y para energías mucho más bajas y cercanas a 5 Mev.

Tabla 1. Cálculo de la velocidad de algunos iones en distintos gases.

GAS	OXÍGENO			ARGÓN			KRYPTON		
	3	5	7	3	5	7	3	5	7
YODO (53)	1.3	1.8	2.5	1.6	1.9	2.5	1.4	1.8	2.3
TÁNTALO (73)	1.2	1.9	2.6	1.5	1.9	2.6	0.6	1.4	1.9
URANIO (92)	1.1	1.8	2.3	0.8	1.4	1.8	1.1	1.7	2.1
FERMIO (100)	1.4	2.0	2.4	1.6	2.1	2.5	1.4	2.0	2.2

Nota: Los valores 3, 5 y 7 corresponden a las cargas medias de los iones.

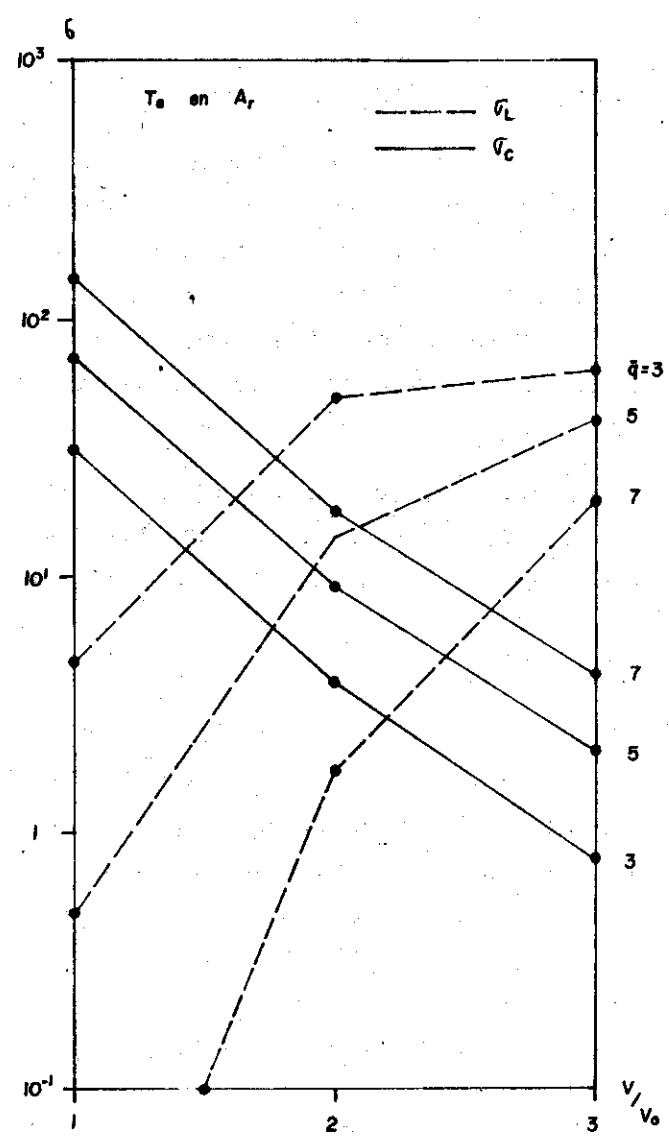


Fig. 1

Figura 1. Dependencia de las secciones transversales de pérdida (r_L) y captura (r_C) de electrones por parte de iones de tántalo en argón, con la velocidad, para distintos valores de la carga media.

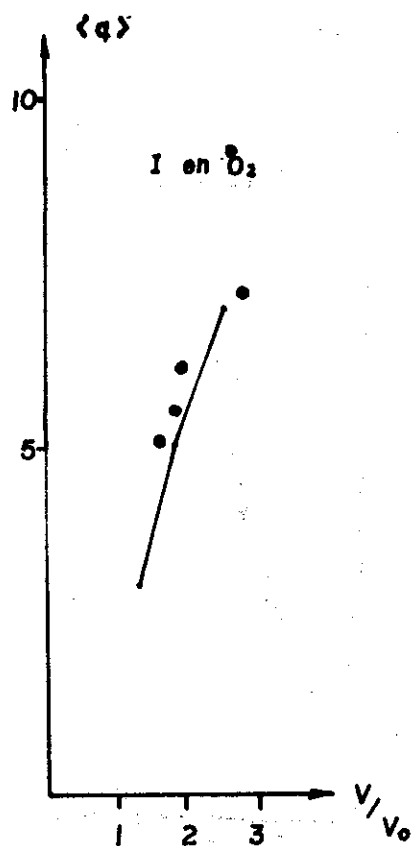


FIG. 2

Figura 2. Dependencia de la carga media de iones de yodo en oxígeno con la velocidad.

Figura 3. Dependencia de la carga media de iones de tántalo en oxígeno con la velocidad.

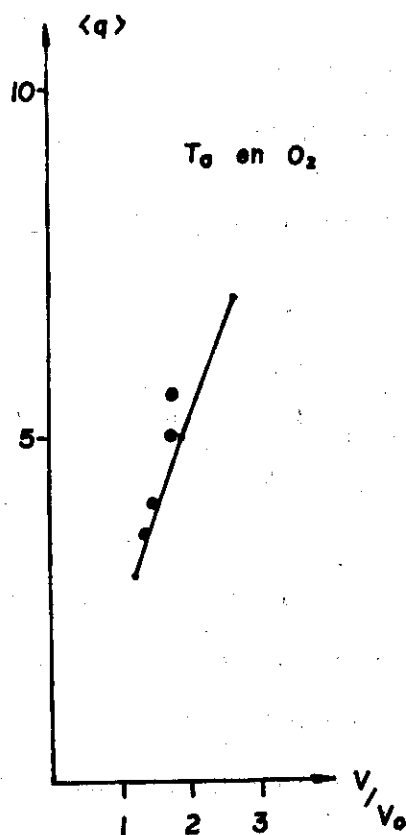


FIG. 3

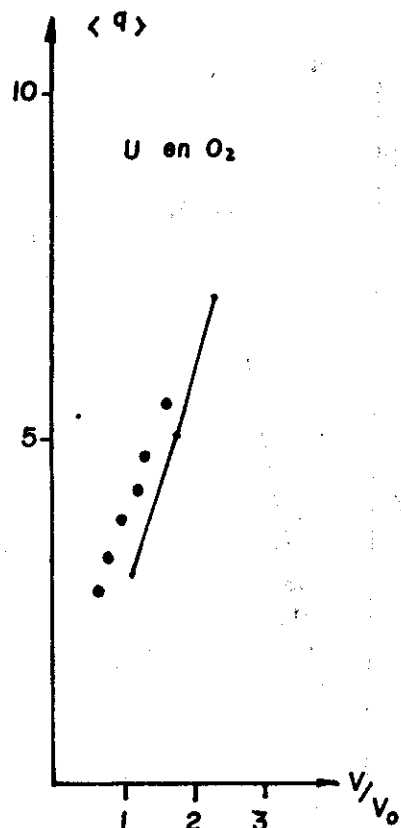


FIG. 4

Figura 4. Dependencia de la carga media de iones de uranio en oxígeno con la velocidad.

Figura 5. Dependencia de la carga media de iones de uranio en argón con la velocidad.

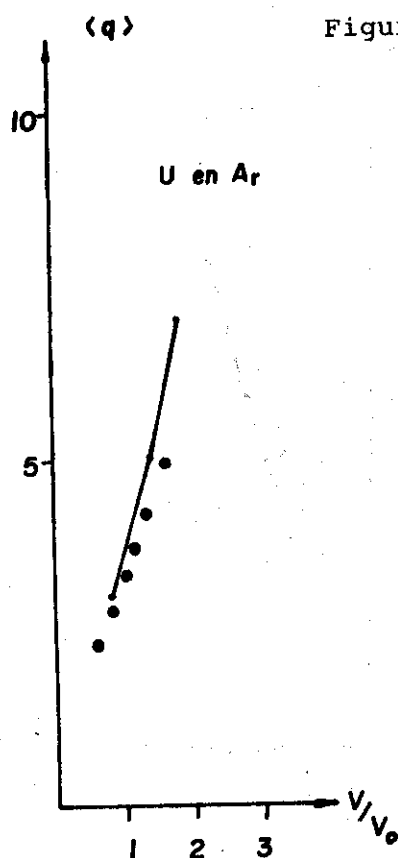


FIG. 5

Figura 6. Dependencia de la carga media de iones de uranio en kriptón con la velocidad.

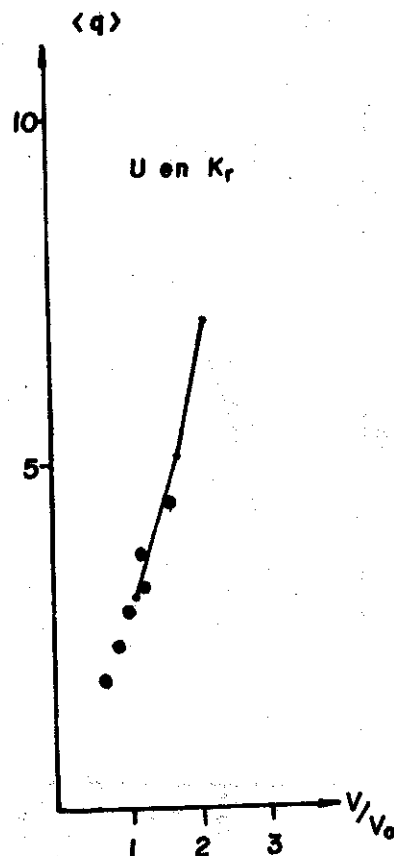


FIG. 6

REFERENCIAS

1. GHIORSO, A. et al. (1988): Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A269: 192.
2. MIYATAKE, A. et al. (1987): Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B26: 309.
3. BERTHES, G. (july 1987): G.S.I. Report, ISSN 0171-4546.
4. OGANESIAN, Yu. T. et al. [en prensa]: Nuclear Instruments and Methods.
5. BETZ, H.D. (1972): Rev. of Modern Physics, 44: 465.
6. BOHR, N. (1940): Phys. Rev., 58: 654.
7. LAMB, W.E. (1940): Phys. Rev., 58: 696.
8. KNIPP, T.K., E. TELLER (1941): Phys. Rev., 59: 659.
9. BELL, G.I. (1953): Phys. Rev., 90: 548.
10. DIMITRIEV, I.S., V.S. NIKOLAEV (1964): Zh.E.T. Fiz., 47: 615.
11. VOROBYEV, N.F. et al. (1988): Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B33: 207.
12. CARLSON, T.A. et al. (1970): Atomic Data, 2: 63.
13. WITTKOWER, A.B. et al. (1973): Phys. Rev., A7: 159.

CALCULO Y ANALISIS DE BOBINAS CORRECTORAS DEL CAMPO MAGNETICO PARA EQUIPOS RMNI CON NUCLEOS DE AIRE: II. BOBINAS CIRCULARES

L. Bergues C. y F. Reguera M., Centro de Biofísica Médica (CBM), Universidad de Oriente.

RESUMEN

Se hace un cálculo teórico de la componente z del campo magnético (B_z) para diferentes configuraciones de bobinas circulares que se usan para corregir las inhomogeneidades del campo magnético. Así como un análisis del (ó) los órdenes más bajos de los gradientes no deseados y maximizar el orden del gradiente deseable. Se optimizan los parámetros de las diferentes configuraciones de bobinas.

ABSTRACT

A theoretical calculus of z component of B_z (magnetic field) is made for different configurations of circular coils being used to correct inhomogeneties of the magnetic field. As well as an analysis of the lowest order or orders of not desired gradients and to make maximum the order of the desired gradient. The parameters of the different configuration of coils are optimized.

1. INTRODUCCIÓN

En [1] se calculó un sistema de bobinas correctoras saddle - shaped para corregir las inhomogeneidades radiales de un electroimán con núcleo de aire para R.M.N.I. Además de estas debe tenerse en cuenta las deformaciones naturales de B_z a lo largo del eje de simetría, las cuales se eliminan con un sistema de bobinas circulares colocadas simétricamente respecto al origen.

En el presente trabajo se hace un análisis detallado del cálculo de estas bobinas usando un desarrollo de Fourier-Bessel; para corregir estas inhomogeneidades se procede a eliminar los gradientes de más bajos órdenes no deseables y maximizar el orden del gradiente deseado.

2. FORMULISMO MATEMÁTICO

En [1] se obtuvo una expresión general de la componente B_z del campo para distintas configuraciones de bobinas saddle-shaped, esta expresión también es válida para sistemas de bobinas circulares. Para cada configuración de bobina se propone una función $F_\varphi(\varphi, z)$ construida sólo con la delta de Dirac ($\delta(x)$), ya que, la función Paso Unitario de Heaviside ($H(x)$) en el proceso de integración es igual a 1, una vez conocida la expresión de $F_\varphi(\varphi, z)$ se le halla su transformada por Fourier dada por (1) y esta se sustituye en la expresión de B_z dada por (2). Para encontrar los parámetros óptimos de las configuraciones de bobinas como son: el número de vueltas (N) y las distancias a que están las bobinas del centro magnético (d_i) ($i = 1, 2, \dots$). Los cálculos se referirán a la espira central y luego se superpondrá el aporte de las otras espiras; finalmente se anula o minimiza el o los órdenes más bajos de los gradientes no deseados y se busca el orden del gradiente a maximizar. Las expresiones (2a) y (7) de [1] serán las utilizadas como base de estos cálculos.

$$F_\varphi^m(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-im\varphi} d\varphi \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikz} F_\varphi(z, \varphi) dz \quad (1)$$

$$B_z = \frac{\mu_0 a}{\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} k e^{im\varphi} e^{ikz} F_\varphi^m(k) I_m(k\rho) K'_m(ka) dk \quad (2)$$

3. EJEMPLOS

a) La Figura 1 muestra una espira circular que produce un campo $B_z \sim z^0$ que está situada en el centro del sistema magnético. Entonces $F_\varphi(\varphi, z)$ tiene la forma:

$$F_{\varphi} = (\varphi, z) = I \delta(z-0) H(\varphi+\pi) [1-H(\varphi+\pi)] \quad (3)$$

Sustituyendo (3) en (1) y luego en (2) es fácil ver que B_z será distinto de cero si $m = 0$

$$B_z = \frac{\mu_0 I a^2}{2} [A_0 + A_1 \rho^2 + A_2 \rho^4 + A_3 \rho^6 + \dots] \quad (4)$$

Si superponemos a esta espira N vueltas, la expresión (4) quedará multiplicada por N . Si $\rho = 0$ se obtiene la componente B_z de una bobina a lo largo del eje z .

$$B_z = \frac{\mu_0 I N a^2}{2} A_0 \quad (4a)$$

donde

$$A_0 = (a^2 + z^2)^{-3/2}$$

b) La Figura 2 muestra dos espiras circulares que respecto al centro magnético se encuentran a una distancia d y por las cuales circulan corrientes en sentidos opuestos. Esta configuración proporciona un campo $B_z \sim z$, siendo

$$F_{\varphi}(\varphi, z) = I [\delta(z-d) - \delta(z+d)] H(\varphi+\pi) [1-H(\varphi+\pi)] \quad (5)$$

Si a una de las espiras se le superpone N_1 vueltas y a la otra N_2 vueltas, entonces el problema es encontrar d , N_1 y N_2 que son los argumentos de los coeficientes del desarrollo. Sustituyendo (5) en (1) y luego en (2) se tiene

$$B_z = \frac{\mu_0 I a N}{\pi} \left[B_1 z + B_2 \left(\frac{z \rho^2}{4} - \frac{z^3}{6} \right) + \right. \\ \left. + B_3 \left(\frac{z \rho^4}{64} - \frac{z^3 \rho^2}{24} \right) + \right]$$

si $\rho = 0$ se llega a

$$B_z = \frac{\mu_0 I a N}{\pi} [B_1 z + B_2' z^3 + B_3' z^5 + \dots] \quad (6a)$$

Si se desea el término de primer orden z basta anular el coeficiente del término de tercer orden z^3 , es decir, $B_2' = 0$, obteniéndose

$$d = \pm(\sqrt{3}/2)a \text{ y } N_1/N_2 = 1.$$

c) La Figura 3 muestra una configuración de tres espiras circulares, en el par externo la corriente I_1 , circula en el mismo sentido y está

ubicada respecto al centro magnético a una distancia d_1 ; por la otra circula una corriente I_2 que va en sentido opuesto a I_1 y está colocada en el centro magnético de la configuración ($d_2 = 0$). Esta configuración proporciona un campo $B_z \sim z^2$. $F_\phi(\phi, z)$ tiene la forma:

$$F_\phi(\phi, z) = I \left[\delta(z-d_1) + \delta(z+d_1) - \delta(z-0) \right] H(\phi+\pi) \cdot \left[1-H(\phi+\pi) \right] \quad (7)$$

Si al par externo se le superpone N_1 vueltas y a la otra N_2 , ahora los coeficientes C_i ($i = 1, 2, \dots$) son funciones de d_1 y N_1/N_2 .

Sustituyendo (7) en (1) y luego en (2) es fácil ver que B_z será distinto de cero, si $m = 0$.

$$B_z = - \frac{\mu_0 I}{2\pi} \left[C_0 + C_1 \left(\frac{\rho^2}{4} - \frac{z^2}{6} \right) + C_2 \left(\frac{\rho^4}{64} - \frac{z^2 \rho^2}{8} + \frac{z^4}{24} \right) + C_3 \left(\frac{\rho^6}{2304} - \frac{z^2 \rho^4}{128} + \frac{z^4 \rho^2}{96} - \frac{z^6}{720} \right) + \dots \right] \quad (8)$$

Si $\rho = 0$

$$B_z = - \frac{\mu_0 I}{2\pi} \left[C_0 + C'_1 z^2 + C'_2 z^4 + C'_3 z^6 + \dots \right] \quad (8a)$$

Si se quiere que el término de segundo orden z^2 sea máximo basta anular los coeficientes de z^0 y z^4 , obteniéndose

$$d_1 = \pm 2.941920095a \quad \text{y} \quad N_1/N_2 = 15$$

d) La Figura 4 muestra una configuración de cuatro espiras circulares, por el par externo circula una corriente I_1 en el mismo sentido y está ubicado respecto al centro magnético a una distancia d_1 . En el par interno circula una corriente I_2 en el mismo sentido, pero en sentido contrario a I_1 y está situado respecto al centro magnético a una distancia d_2 . Esta configuración se utiliza para obtener un campo $B_z \sim z^2$ y $B_z \sim z^4$. Para estos dos casos se obtuvo que

$$F_\phi(\phi, z) = I \left[\delta(z-d_1) + \delta(z+d_1) - \delta(z-d_2) - \delta(z+d_2) \right] \cdot H(\phi+\pi) \left[1-H(\phi+\pi) \right] \quad (9)$$

Si al par externo le superponemos N_1 vueltas y al interno N_2 vueltas, los coeficientes del desarrollo son funciones de d_1 , d_2 y N_1/N_2 .

Sustituyendo (9) en (1) y luego en (2) es fácil ver que B_z será distinto de cero, si $m = 0$

$$B_z = - \frac{\mu_0 I}{2\pi} \left[D_0 + D_1 \left(\frac{\rho^2}{4} - \frac{z^2}{6} \right) + D_2 \left(\frac{\rho^4}{64} - \frac{z^2 \rho^2}{8} + \frac{z^4}{24} \right) + \right. \\ \left. + D_3 \left(\frac{\rho^6}{2304} - \frac{z^2 \rho^4}{128} - \frac{z^4 \rho^2}{96} - \frac{z^6}{720} + \dots \right) \right] \quad (10)$$

Si $\rho = 0$.

$$B_z = - \frac{\mu_0 I}{2\pi} \left[D_0 + D_1' z^2 + D_2' z^4 + D_3' z^6 + \dots \right] \quad (10a)$$

Si se desea el término de segundo orden z^2 basta anular los coeficientes de z^0 y z^4 teniéndose

$$d_1 = \pm 1.592864217a, \quad d_2 = \pm 0.2669422037a \quad \text{y} \quad N_1/N_2 = 6$$

Si se desea el término de cuarto orden z^4 basta anular los coeficientes de z^0 y z^2 teniéndose

$$d_1 = \pm 2.378746697a, \quad d_2 = \pm 0.7340984559a \quad \text{y} \quad N_1/N_2 = 9$$

e) La Figura 5 muestra una configuración de cuatro espiras circulares. En el par externo la corriente que circula está en sentido opuesto (I_{11} e I_{12}) y se encuentra a una distancia d_1 del centro magnético. En el par interno la corriente circula en sentido opuesto (I_{21} e I_{22}) pero en sentido contrario a I_{11} e I_{12} respectivamente, y está a una distancia d_2 del centro magnético. Esta configuración proporciona un campo $B_z \sim z^3$, se tiene que

$$F_\varphi(\varphi, z) = I \left[-\delta(z-d_1) + \delta(z+d_1) + \delta(z-d_2) - \delta(z+d_2) \right] \cdot H(\varphi+\pi) \left[1-H(\varphi+\pi) \right] \quad (11)$$

Si al par externo le superponemos N_1 vueltas y al interno N_2 , los coeficientes del desarrollo son funciones de d_1 , d_2 y N_1/N_2 .

Sustituyendo (11) en (1) y luego en (2) es fácil ver que B_z será distinto de cero, si $m = 0$

$$B_z = \frac{\mu_0 I}{\pi} \left[E_0 z + E_1 \left(\frac{z \rho^2}{4} - \frac{z^3}{6} \right) + E_2 \left(\frac{z \rho}{64} - \frac{z^3 \rho^2}{24} + \frac{z^5}{120} + \dots \right) \right] \quad (12)$$

Si $\rho = 0$

$$B_z = \frac{\mu_0 I}{\pi} \left[E_0 z + E_1' z^3 + E_2' z^5 + \dots \right] \quad (12a)$$

Si se desea el término de tercer orden z^3 basta anular los coeficientes de z^1 y z^5 obteniéndose

$$d_1 = \pm 1.559282419a, \quad d_2 = \pm 0.5155212314a \quad \text{y} \quad N_1/N_2 = 4$$

4. DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

La forma de proceder para el cálculo de la componente B_z del campo para distintas configuraciones de bobinas circulares para corregir las inhomogeneidades del campo magnético es: proponer la configuración de bobinas con sus respectivos sentidos de las corrientes, una vez propuesta esta, mediante la función $F_\phi(\phi, z)$ se describe el sentido de circulación en cada bobina y a qué distancia están estas del centro magnético, esto se hace a través de la delta de Dirac ($\delta(z - d_i)$), $i = 1, 2, \dots$, que fija las posiciones de las espiras, y de la función Paso Unitario de Heaviside ($H(x)$), que describe por donde circula corriente el sentido de esta viene dado por el signo que acompaña la delta (el signo de la corriente será positivo si esta circula saliendo del papel). Una vez propuesta $F_\phi(\phi, z)$ se le halla su transformada de Fourier $F_\phi^m(k)$ dada por (1) y luego esta se sustituye en la expresión (2) y se ve fácilmente que las expresiones de B_z obtenidas para las configuraciones son distintas de cero si $m \neq 0$. Para cada configuración de bobina existirá una $F_\phi(\phi, z)$ específica y por tanto habrá formas de B_z para cada una de ellas. Las expresiones de B_z obtenidas para cada configuración son funciones de ρ y z , si $\rho = 0$ ellas coinciden con las reportadas en [2]. Las ecuaciones (4) y (6) son análogas con las reportadas en [4], si en este último se desprecia el efecto de apantallamiento y además este desarrollo de Fourier-Bessel es de más fácil manejo que el propuesto por Hoult [2], ya que evita trabajar con sumas discretas; las integrales que aparecen vienen tabuladas [5], [6], [7] de ahí la comodidad de trabajarlas y la simplicidad de las expresiones obtenidas, en este desarrollo los términos aparecen directos.

En artículos ulteriores se publicarán los efectos que provocaron las bobinas shims calculadas en el mejoramiento de la homogeneidad del sistema magnético.

6. AGRADECIMIENTOS

Agradecemos al Dr. R. Riera A. por sus sugerencias y corrección en la elaboración de este trabajo.

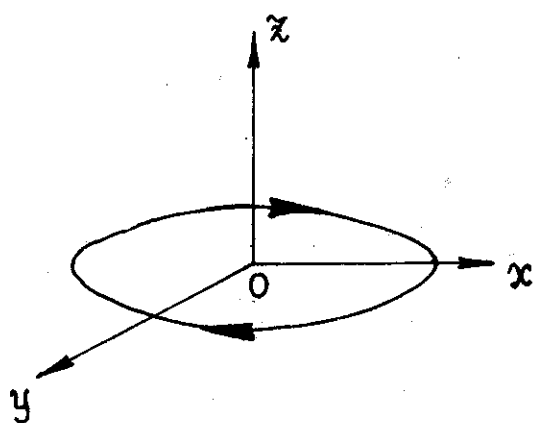


FIG. 1

Figura 1. Muestra una espira circular que produce un campo $B_z \sim z^0$ que está situada en el centro del sistema magnético.

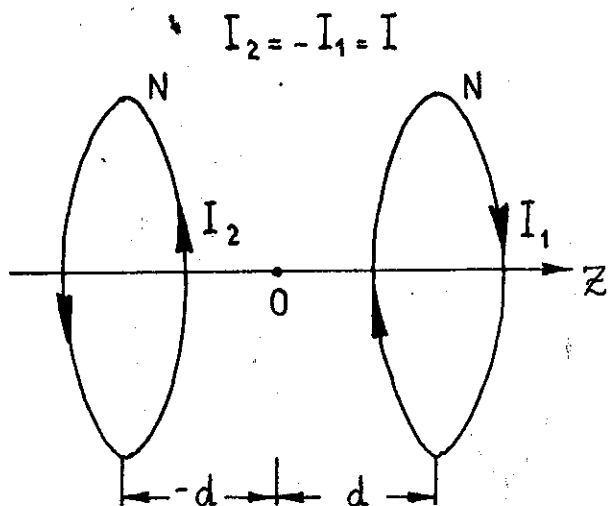


FIG. 2

Figura 2. Muestra dos espiras circulares que respecto al centro magnético se encuentran a una distancia d y por las cuales circulan corrientes en sentidos opuestos.

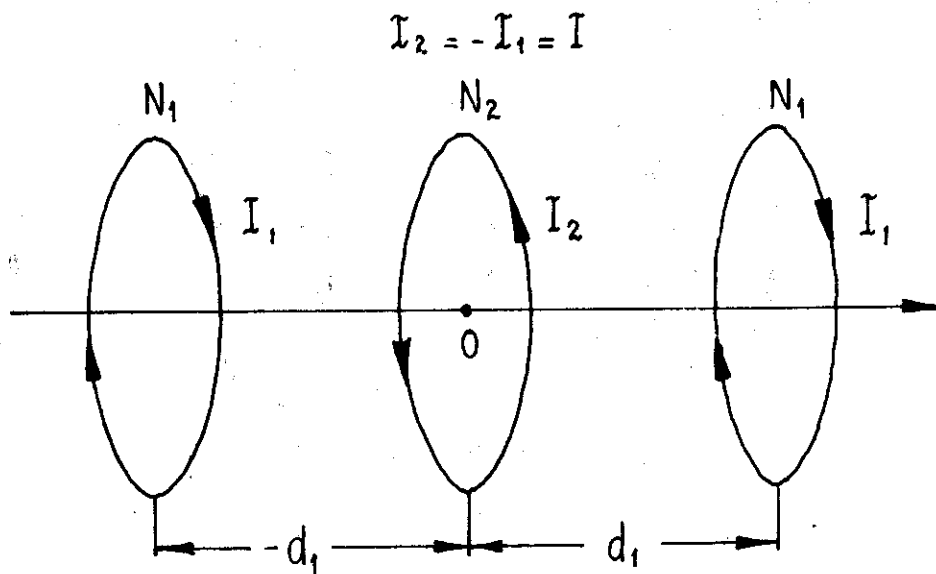


FIG. 3

Figura 3. Muestra una configuración de tres espiras circulares.

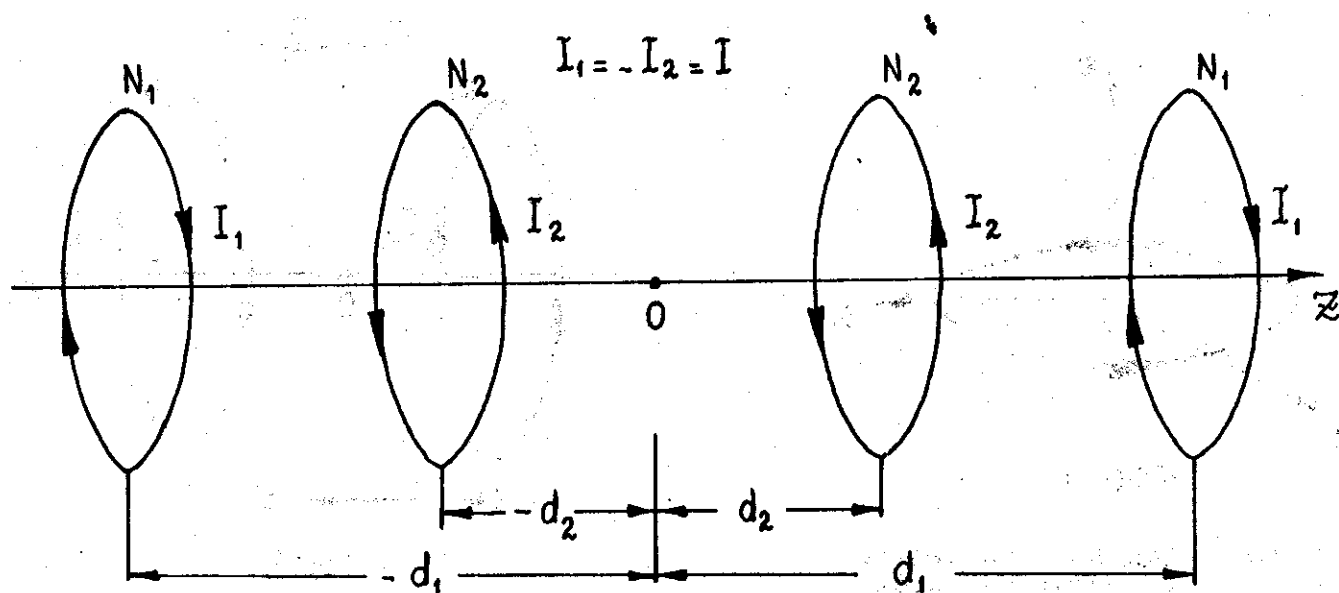


FIG. 4

Figura 4. Muestra una configuración de cuatro espiras circulares.

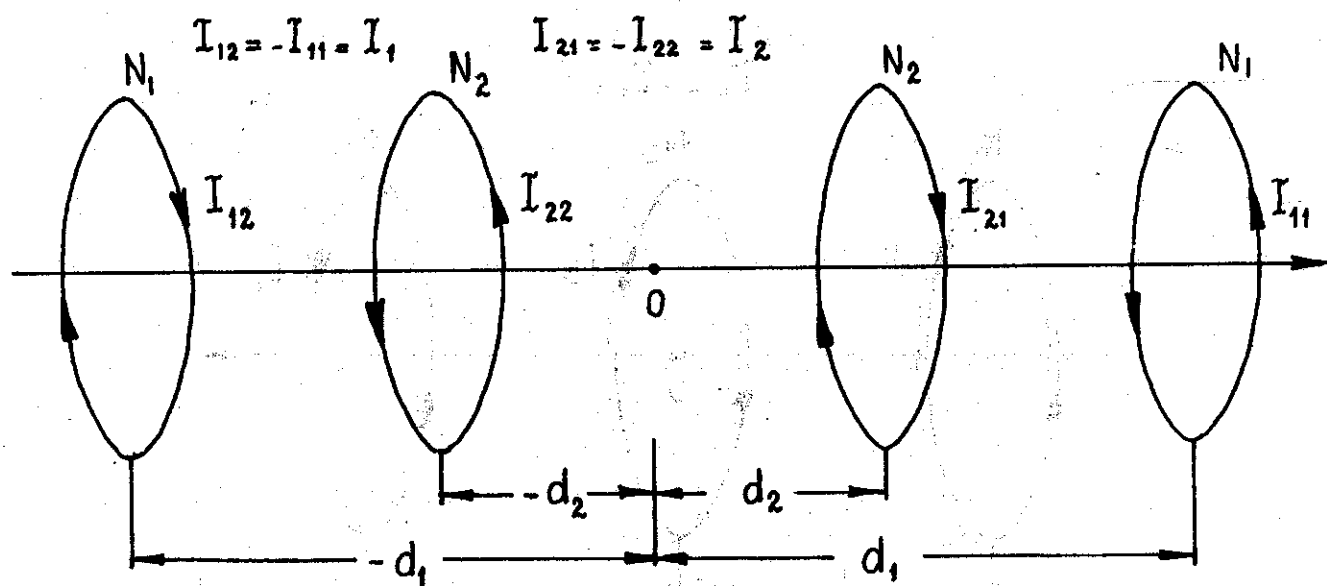


FIG. 5

Figura 5. Muestra una configuración de cuatro espiras circulares.

7. REFERENCIAS

- [1] BERGUES, L. y F. REGUERA [en prensa]: Revista Cubana de Física.
- [2] ROMEO, F. and D.I. HOULT (1984): Magn. Reson. in Medicine, 1, 44-65.
- [3] ANDERSON, N.A. (1961): Rev. Sci. Instrum., 32, 241-250.
- [4] TURNER, R. and R.M. BOWLEY (1986): J. Phys., E:Sci. Instrum.
- [5] DITKIN, V.A. and A.P. PRUDNIKOV (1965): Integral Transforms and Operational Calculus, (Pergamon Press).
- [6] LEBEDEV, V.N. (1965): Special function and Their applications, Prentice-Hall, INC. Englewood, Cliffs, N.J.
- [7] SPIEGEL, M.R.: Manual de Fórmulas y Tablas Matemáticas, Editorial Dossat, S.A.

SOLITONES Y BURBUJAS SOLITONICAS EN CAMPOS EXTERNOS

Jorge A. González, Departamento de Física, Universidad de Camagüey.

RESUMEN

Se obtienen expresiones exactas para estados ligados solitón-antisolitón, fuerza de interacción solitón-antisolitón; solitones en campos externos no homogéneos y burbujas solitónicas tridimensionales.

ABSTRACT

Exact expressions for bound soliton-antisoliton states; soliton-antisoliton interaction force; solitons in inhomogeneous external fields and three-dimensional solitonic bubbles are obtained.

I. Es conocido el importante papel que juegan los solitones en la física moderna y en particular en la descripción de paredes de dominio durante transiciones de fase estructurales en cuerpos sólidos, así como partículas elementales en la teoría del campo [1-6].

Para el estudio de campos escalares, uno de los modelos más empleados es la llamada teoría ϕ^4 [2-4, 7]. Mucho menos conocida es la teoría del potencial "módulo cuadrado", $(|\phi| - 1)^2$, [4] que, sin embargo, puede servir de alternativa a la teoría ϕ^4 .

La teoría $(\phi - 1)^2$ también posee solitones y antisolitones. Su ventaja radica en que pueden obtenerse soluciones solitónicas exactas para un gran número de problemas no solubles en los marcos de otras teorías pero cualitativamente equivalentes.

Esta propiedad ha sido asombrosamente poco explotada en la literatura.

En la presente comunicación se presentarán soluciones exactas a los siguientes problemas: estados ligados solitón-antisolitón bajo la acción de una fuerza constante, fuerza de interacción solitón-antisolitón, solitones en campos externos no homogéneos; solitón tridimensional que describe una burbuja de una fase en otra. También se harán consideraciones generales que permiten conocer la dinámica de los solitones en campos variables.

II. La lagrangiana en la teoría $(\phi - 1)^2$ en variables adimensionales es la siguiente

$$L = \int \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 - (\phi - 1)^2 \right] d^0x \quad (1)$$

La ecuación del campo unidimensional es

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - 2 \operatorname{sgn}(\phi) (\phi - 1) = 0 \quad (2)$$

Aunque la ecuación (2) es no lineal puede ser expresada en forma lineal en los intervalos $\phi > 0$ y $\phi < 0$.

Utilizando esta propiedad no es difícil obtener la conocida solución solitónica.

$$\phi_s = \operatorname{sgn} z (1 - \exp [-\operatorname{sgn}(z) \sqrt{2} z]) \quad (3)$$

donde $z = \frac{x - vt - x_0}{\sqrt{1 - v^2}}$

Aquí x_0 es la posición inicial del solitón, v es la velocidad del solitón.

También existe el antisolitón

$$\phi_a = -\phi_s$$

En nuestros trabajos [5-7] se mostró que si en el medio existe una fuerza constante, entonces pueden formarse estados ligados solitón-antisolitón.

Veamos la ecuación

La condición para que (8) posea solitones es que existan tres puntos críticos [5, 7, 9] y esto se cumple si

$$|h(x)| < 2, \text{ para } -\infty < x < \infty$$

Para ser más concretos, tomemos un caso particular en que $h(x)$ posee un cero en el origen. En específico, supongamos que $h(x)$ tiene forma de solitón:

$$h(x) = a \operatorname{Sgn} x (1 - \exp [-\operatorname{Sgn}(x) dx]) \quad (9)$$

En este caso existen dos tipos de soluciones estacionarias, una solitónica:

$$\varphi = \operatorname{Sgn} x \left(1 - \frac{a}{2} + \frac{\frac{a}{2}}{(d^2 - 2)} + \frac{a}{2} - \frac{1}{2} \exp [-\operatorname{Sgn}(x) dx] + \frac{a}{(2 - d^2)} \exp [-\operatorname{Sgn}(x) dx] \right) \quad (10a)$$

Y una antisolitónica:

$$\varphi = \operatorname{Sgn} x \left(-1 - \frac{a}{2} + \left(\frac{a}{(d^2 - 2)} + 1 + \frac{a}{2} \right) \exp [-\operatorname{sgn}(x) \sqrt{2} x] + \frac{a}{(2 - d^2)} \exp [-\operatorname{Sgn}(x) dx] \right) \quad (10b)$$

Empleando los métodos tradicionales para la investigación de la estabilidad de los solitones [3, 4, 9] es fácil mostrar que para $ad > 0$ la solución solitónica es inestable, mientras que la antisolitónica es estable. Para $ad < 0$ ocurre lo contrario.

IV. En los trabajos [10, 11] han sido estudiadas soluciones aproximadas tridimensionales esféricas que describen burbujas, provocadas por transiciones de fase.

Los estados estacionarios con simetría radial esférica en la teoría del potencial "módulo cuadrado" son soluciones de la ecuación

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} - 2 \operatorname{Sgn}(\varphi) (|\varphi| - 1) = h \quad (11)$$

Sea $h > 0$. En este caso la solución que describe una burbuja estacionaria tiene las propiedades

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \varphi = 1 - \frac{h}{2}, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial r} / r=0 = 0, \quad \varphi / r=0 < 0.$$

Para $\varphi > 0$ la solución de (11) es

$$\varphi = 1 - \frac{h}{2} + \frac{c \exp (-\sqrt{2} r)}{r} \quad (12)$$

Las burbujas descritas por las soluciones (11) y (12) son inestables [10, 11] y pueden contraerse o expandirse.

Realmente, ellas se forman debido al equilibrio de dos fuerzas: la fuerza de atracción entre las paredes de la burbuja (las paredes de la burbuja tridimensional se forman con "ladrillos" solitónicos unidimensionales de tal forma que los "ladrillos solitónicos en la pared de enfrente poseen "ladrillos antisolitónicos" con los cuales se atraen mutuamente) y la fuerza h que actúa sobre cada punto de la pared, pero hacia el exterior.

Una burbuja que posea un radio inferior al crítico (10) tiende a colapsar. Las burbujas de radio superior se expanden. Todo depende de la fuerza que predomine.

Este comportamiento de las burbujas es conocido experimentalmente en termodinámica [12].

La fórmula (16) permite calcular el radio crítico incluso para campos externos intensos.

REFERENCIAS

- [1] LONNGREN, K., A. SCOTT (1978): Solitons in action, Academic Press, London.
- [2] BISHOP, A.R., J.A. KRUMHANS, S.E. TRULLINGER (1980): Physica Q1, 1.
- [3] MAKHANKOV, V.G. (1978): Phys. Reports 35, 1.
- [4] MAKHANKOV, V.G., V.K. FEDYANIN (1984): Phys. Rep. 104, 1.
- [5] GONZÁLEZ, J.A., J.A. HOLYST (1987): Phys. Review B35, 3643.
- [6] ----- (1986): "Solitary waves in one-dimensional damped systems".
ICTP, Trieste, Int. Report Ic/86/122.
- [7] GONZÁLEZ, J.A. "Exact soliton-like solutions of perturbed ϕ^4 - equation".
ICTP, Trieste, Int. Report Ic/86/79 (1986).
- [8] GONZÁLEZ, J.A., J. ESTRADA-SARLABOUS: "Kinks in systems with degenerate critical points".
ICTP, Trieste, Int. Report IC/88/259 (1988).
Phys. Lett. A 140, 189 (1989).
- [9] FURUNDJIEV, R., J.A. GONZÁLEZ: "Solitones en campos externos no homogéneos".
Ciencias Fisicomatemáticas Uc - 3 - 1988, pág. 10 Prep. - Universidad de Camagüey.

DESCRIPCION DE LA ADSORCION EN ZEOLITAS MEDIANTE UN MODELO DE GAS RETICULAR EXACTAMENTE SOLUBLE

C. Rodríguez y M.T. Pérez, Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana.

RESUMEN

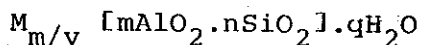
Para describir la adsorción de moléculas monoatómicas u homopolares en zeolitas se propone un modelo de gas reticular que tiene en cuenta la inhomogeneidad del potencial en las cavidades, el movimiento de las moléculas y la interacción entre las mismas. La diagonalización del hamiltoniano permite calcular las energías de los estados de las moléculas adsorbidas en una cavidad y obtener una expresión exacta para el recubrimiento en función de la presión y la temperatura, que es utilizada para ajustar las isothermas experimentales de adsorción de N_2 en Na-FAU (NaX).

ABSTRACT

A lattice gas model is proposed to describe adsorption of monoatomic or homopolar molecules in zeolites, taking into account nonhomogeneities of the potential, molecular motion and intermolecular interaction inside zeolitic cavities. Diagonalizing the hamiltonian, the energy states of adsorbed molecules and the exact expression for coverage as a function of pressure and temperature are obtained. This theoretical isotherm is used to fit experimental data on N_2 adsorption in Na-FAU (NaX).

1. INTRODUCCIÓN

Las zeolitas son aluminosilicatos cristalinos, cuya red está formada por tetraedros SiO_4 y AlO_4^- conectados de forma tal que cada átomo de oxígeno pertenece a dos tetraedros vecinos. Estos elementos forman una armazón cargada negativamente con cavidades y canales de dimensiones moleculares, cuyas estructuras son bien conocidas [1]. Los cationes (Na^+ , K^+ , Ca^{++} , Mg^{++} , etc.) que compensan la carga negativa de la armazón se localizan en sitios de las cavidades y canales y son intercambiables por otros cationes [2]. La fórmula química clásica de las zeolitas es: [3]



donde M son los cationes de valencia v, $q\text{H}_2\text{O}$ representa la fase adsorbida, cuya desorción por calentamiento suele ser reversible y deja un arreglo periódico tridimensional de cavidades interconectadas que permite la adsorción de moléculas de dimensiones menores que el diámetro de los canales. La presencia de una red de microporos concede a las zeolitas propiedades físico-químicas únicas y determina su amplio uso como adsorbentes selectivos, intercambiadores iónicos, electrolitos sólidos y catalizadores [3].

En la descripción estadística de la adsorción en zeolitas [4-11] suele considerarse el espacio interior de la misma como un ensemble gran canónico de cavidades cuasi-independientes que intercambian moléculas a través de los canales. Las isothermas de adsorción resultantes han sido comparadas con la data experimental por Barrer [12] y el ajuste realizado no puede considerarse aún satisfactorio. Cálculos realizados por el método de Montecarlo muestran que las simplificaciones más usuales: potencial homogéneo en la cavidad, moléculas inmóviles e interacción del tipo de esferas rígidas resultan irreales hasta para los gases nobles, y afectan sensiblemente los resultados [9].

Más recientemente, se han encontrado evidencias de isothermas de adsorción con escalones y lazos de histéresis en nuevas zeolitas de alto contenido de silicio, como la ZM-5 [13, 14]. El hecho de que esto ocurra en cristales relativamente grandes y bien definidos, no permite atribuir el fenómeno a factores extrínsecos, tales como severas imperfecciones del sistema de canales y cavidades o inhomogeneidades en la composición catiónica. Lo anterior sugiere que este comportamiento anómalo tenga un carácter fundamental en la adsorción zeolítica y plantea el problema, aún no resuelto, de dar una explicación cuantitativa del mismo [15].

El presente trabajo pretende modelar la adsorción en zeolitas, estudiar los estados posibles de las moléculas en las cavidades, derivar las isothermas de adsorción correspondientes y discutir las propiedades de estas

en dependencia de los parámetros del modelo, que tienen un sentido físico microscópico bien definido.

II. MODELO

La Figura (1) describe esquemáticamente una zeolita típica constituida por tres subsistemas que interactúan:

- A- la armazón rígida del aluminosilicato.
- B- las moléculas adsorbidas.
- C- los cationes intercambiables.

El hamiltoniano de la zeolita puede escribirse en la forma:

$$H_Z = H_A + H_B + H_C + H_{AB} + H_{AC} + H_{BC} \quad (1)$$

donde cada uno de los hamiltonianos representa lo siguiente:

H_A , la energía de la armazón (energía de enlace y oscilaciones de la red).

H_B , la energía cinética y potencial de interacción entre las moléculas adsorbidas, así como su energía de interacción con los átomos de la armazón y los cationes, fijos en sus posiciones de equilibrio.

H_C , la energía cinética y potencial de interacción de los cationes, así como su energía de interacción con los átomos de la armazón fijos en sus posiciones de equilibrio.

H_{AB} , la energía de interacción de las moléculas y las oscilaciones de la armazón cristalina.

H_{AC} , la energía de interacción de los cationes y las oscilaciones de la armazón cristalina.

H_{BC} , la energía de interacción de las moléculas adsorbidas con los cationes debida al movimiento de estos últimos.

Como la armazón cristalina es muy rígida y la movilidad de los cationes muy baja, al estudiar la adsorción en equilibrio (y no su cinética) pueden considerarse los átomos de la armazón y los cationes inmóviles en sus posiciones de equilibrio. Esto permite ignorar los términos H_{AB} y H_{BC} y tomar en cuenta solamente el hamiltoniano H_B de las moléculas adsorbidas.

Para describir los estados de moléculas monoatómicas u homopolares adsorbidas en las cavidades zeolíticas se propone el siguiente modelo de gas reticular que representa de modo simple la interacción de las moléculas con la armazón y los cationes:

$$\hat{H}_B = \sum_{i=1}^N \hat{H}_{Bi} \quad (2)$$

$$\hat{H}_{Bi} = -(\epsilon + \mu) \sum_{\alpha=1}^{N_0} \hat{b}_{i\alpha}^+ \hat{b}_{i\alpha} - t \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{b}_{i\alpha}^+ \hat{b}_{i\beta} - \frac{U}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{b}_{i\alpha}^+ \hat{b}_{i\alpha} \hat{b}_{i\beta}^+ \hat{b}_{i\beta}$$

donde "i" indica las N cavidades idénticas, cada una de las cuales posee N_0 sitios idénticos de adsorción "α", en los cuales la energía -ε de la molécula es mínima. El segundo término representa la energía del movimiento de las moléculas de un sitio a otro y el tercero, la de interacción entre moléculas adsorbidas en una misma cavidad. Los operadores de Pauli $\hat{b}_{i\alpha}^+$, $\hat{b}_{i\alpha}$ describen la adsorción o desorción de moléculas en el sitio "α" de la cavidad "i" y $\mu(p, T)$ es el potencial químico de la fase líquida o gaseosa externa en equilibrio con las moléculas adsorbidas dentro de la zeolita.

III. DIAGONALIZACIÓN DEL HAMILTONIANO

El modelo (2) puede ser resuelto exactamente expresando los operadores de Pauli en términos de los operadores de espín 1/2 [16].

$$\hat{b}_{i\alpha} = \hat{S}_{i\alpha x} + i\hat{S}_{i\alpha y}; \quad \hat{b}_{i\alpha}^+ = \hat{S}_{i\alpha x} - i\hat{S}_{i\alpha y}; \quad \hat{b}_{i\alpha}^+ \hat{b}_{i\alpha} = \frac{1}{2} - \hat{S}_{i\alpha z} \quad (3)$$

e introduciendo los operadores $\hat{J}_i$ y $\hat{J}_{iz}$ del momentum angular total y su componente z:

$$\hat{J}_i = \sum_{\alpha=1}^{N_0} \hat{S}_{i\alpha}; \quad \hat{J}_{iz} = \sum_{\alpha=1}^{N_0} \hat{S}_{i\alpha z} \quad (4)$$

en términos de los cuales $\hat{H}_{Bi}$ adopta la forma siguiente:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{Bi} = & -\frac{N_0}{2} \left\{ \epsilon + \mu - t + \frac{U}{4} (N_0 - 2) \right\} + \left\{ \epsilon + \mu + \frac{U}{2} (N_0 - 1) \right\} \hat{J}_{iz} + \\ & + \left\{ t - \frac{U}{2} \right\} \hat{J}_{iz}^2 - t \hat{J}_i^2 \end{aligned} \quad (5)$$

y sus autovalores resultan:

$$\begin{aligned} E_{jm} = & -\frac{N_0}{2} \left\{ \epsilon + \mu - t + \frac{U}{4} (N_0 - 2) \right\} + \left\{ \epsilon + \mu + \frac{U}{2} (N_0 - 1) \right\} m + \\ & + \left\{ t - \frac{U}{2} \right\} m^2 - t j(j+1) \end{aligned} \quad (6)$$

donde $m = -\frac{N_0}{2}, \dots, \frac{N_0}{2}$ y $j = |m|, |m| + 1, \dots, \frac{N_0}{2}$.

Estos autovalores representan las energías de los estados posibles del conjunto de moléculas adsorbidas en una cavidad, considerando de modo

simple el potencial no homogéneo de la dimensión, moléculas y la interacción entre las mismas.

Si $n = \frac{N_0}{2} - m$ representa el número de moléculas adsorbidas en la cavidad en el estado m , en términos de j y n los autovalores son:

$$E_{jn} = -(\epsilon + \mu)n - \frac{U}{2}n(n-1) - t \left\{ j(j+1) - \left(n - \frac{N_0}{2}\right)^2 - \frac{N_0}{2} \right\}$$

$$\text{con } j = \left| \frac{N_0}{2} - n \right|, \dots, \frac{N_0}{2} \text{ y } n = 0, 1, \dots, N_0.$$

Si $U > 0$ (atracción molecular), la energía del sistema disminuye monótonamente al aumentar el número de moléculas en la cavidad. En cambio, el término proporcional a t no tiene un signo definido y origina un desdoblamiento de los niveles, cuya energía no depende solamente del número de moléculas en la cavidad. Partiendo de sitios de adsorción idénticos se obtienen múltiples niveles de adsorción en cada cavidad como consecuencia del movimiento y la interacción molecular.

Para cada valor de n corresponden

$$\frac{N_0!}{n! (N_0 - n)!} = \frac{N_0!}{\left(\frac{N_0}{2} - m\right)! \left(\frac{N_0}{2} + m\right)!} \text{ formas de colocar } n \text{ moléculas}$$

indistinguibles en N_0 sitios idénticos, con no más de una molécula por sitio. Como para cada valor de m hay $\frac{N_0}{2} - |m| + 1$ valores posibles de j , resulta que, para cada par j, m corresponden $D(m)$ estados, donde

$$D(m) = \frac{N_0!}{\left(\frac{N_0}{2} + |m|\right)! \left(\frac{N_0}{2} + |m| + 1\right)!} \quad (7)$$

IV. ISOTERMAS DE ADSORCIÓN. COMPARACIÓN CON LOS DATOS EXPERIMENTALES.

Con ayuda de los autovalores (6) la función de partición gran canónica Ξ_B se expresa por:

$$\Xi_B = (\Xi)^N; \quad \Xi = \sum_{m=N_0/2}^{N_0/2} \sum_{j=|m|}^{N_0/2} e^{-\beta E_{jm}} D(m); \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad (8)$$

y el recubrimiento $\theta = \langle \hat{b}_{i\alpha}^+ \hat{b}_{i\alpha} \rangle$ resulta

$$\theta = \frac{1}{N_0} \frac{\partial}{\partial \beta \mu} \ln \Xi = \frac{1}{N_0 \Xi} \sum_{m=-N_0/2}^{N_0/2} \sum_{j=|m|}^{N_0/2} e^{-\beta E_{jm}} D(m) \quad (9)$$

Para la adsorción desde la fase gaseosa, utilizando la expresión de μ para el gas ideal:

$$\mu = kT \ln \frac{P}{P_0(T)}$$

y definiendo

$$p_1(T) = p_0(T) e^{-\beta \left[\epsilon + \frac{N_0 - 1}{2} U \right]} \quad (10)$$

obtenemos la isoterma de adsorción:

$$\theta = \frac{1}{2} + \frac{1}{N_0} \frac{\sum_{m=-N_0/2}^{N_0/2} e^{\beta(t - \frac{U}{2})m^2} \left(\frac{p}{p_1} \right)^m D(m) \sum_{j=|m|}^{N_0/2} e^{\beta t j(j+1)}}{\sum_{m=-N_0/2}^{N_0/2} e^{\beta(t - \frac{U}{2})m^2} \left(\frac{p}{p_1} \right)^m D(m) \sum_{j=|m|}^{N_0/2} e^{\beta t j(j+1)}}$$

En el caso trivial $t = 0$, $U = 0$, se obtiene la conocida isoterma de Langmuir:

$$\theta = \frac{1}{1 + \frac{p_1}{p}}$$

En [17] se ha reportado una investigación detallada de las isotermas de adsorción de N_2 en mallas moleculares Na-FAU en un amplio intervalo de temperaturas y presiones.

De la masa de adsorción límite $\left(\frac{\Delta m}{M} \right)_{\max} = 0.1503 \text{ gg}^{-1}$ se deriva el valor $N_0 = 10$ y de la condición $\theta(p_1) = 1/2$ se obtiene $p_1(T)$. El ajuste por mínimos cuadrados de los datos experimentales a las isotermas teóricas (11) conduce a los valores $t = 9.6 \text{ kJ/mole}$ (0.10 eV) y $U = 12.5 \text{ kJ/mole}$ (0.13 eV). Puesto que $U > 0$, la interacción entre moléculas es atractiva y su efecto siempre será disminuir la energía del sistema al aumentar el número de moléculas en la cavidad. La comparación gráfica se muestra en la Figura (2).

V. CONCLUSIONES

El modelo propuesto toma en cuenta las peculiaridades más importantes de la adsorción en zeolitas: cuasiindependencia de las cavidades, existencia de sitios preferenciales de adsorción, movimiento de las moléculas adsorbidas e interacción entre las mismas. Su solución exacta permite conocer los posibles estados de las moléculas en una cavidad y calcular nuevas isotermas de adsorción que ajustan correctamente la data experimental.

El modelo contiene algunas simplificaciones importantes entre las que se destaca que la energía de interacción y la probabilidad de salto no dependen de los sitios, lo cual puede resultar poco realista en el caso $N_0 \gg 1$.

La posible ocurrencia de comportamientos anómalos (escalones de adsorción y lazos de histéresis) en el marco de este modelo, así como la influencia de la interacción y transiciones entre cavidades se discutirán en otro trabajo.

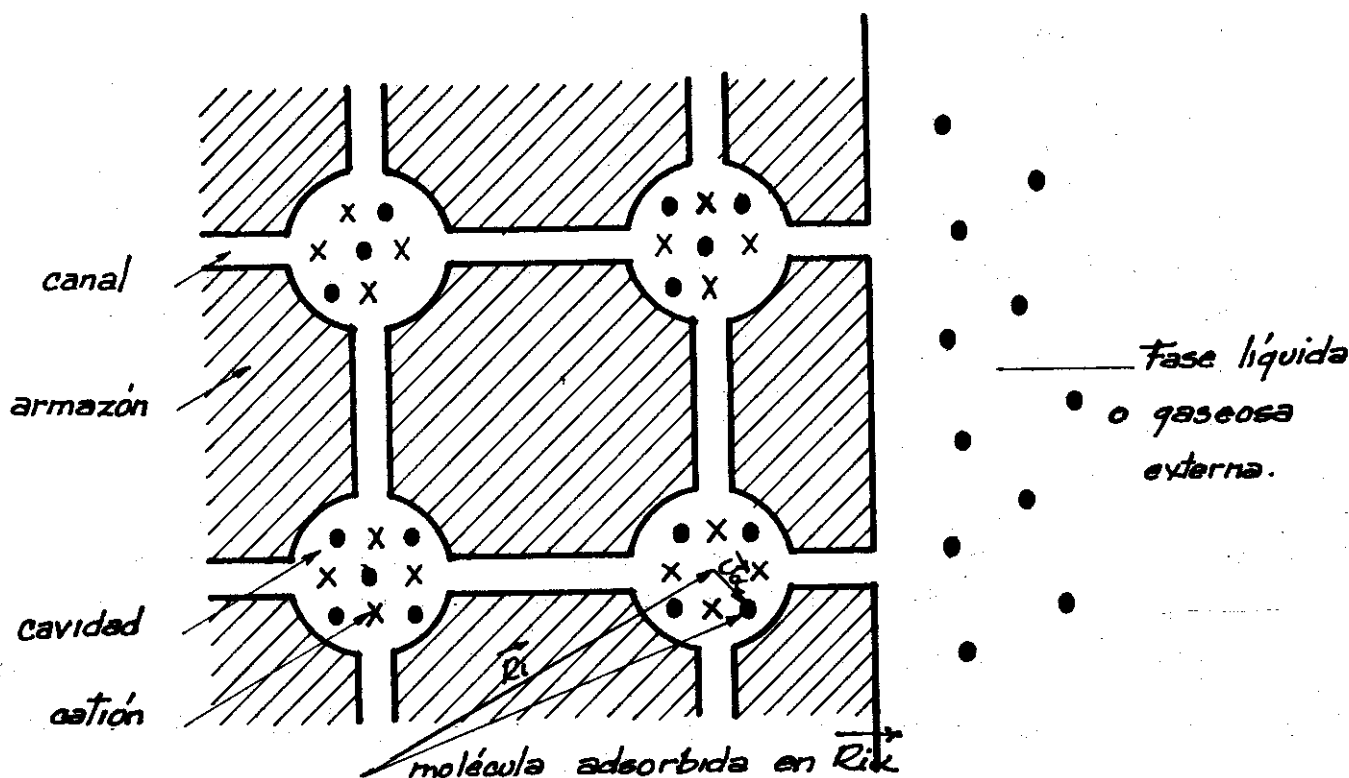


Figura 1. Representación esquemática de una zeolita.

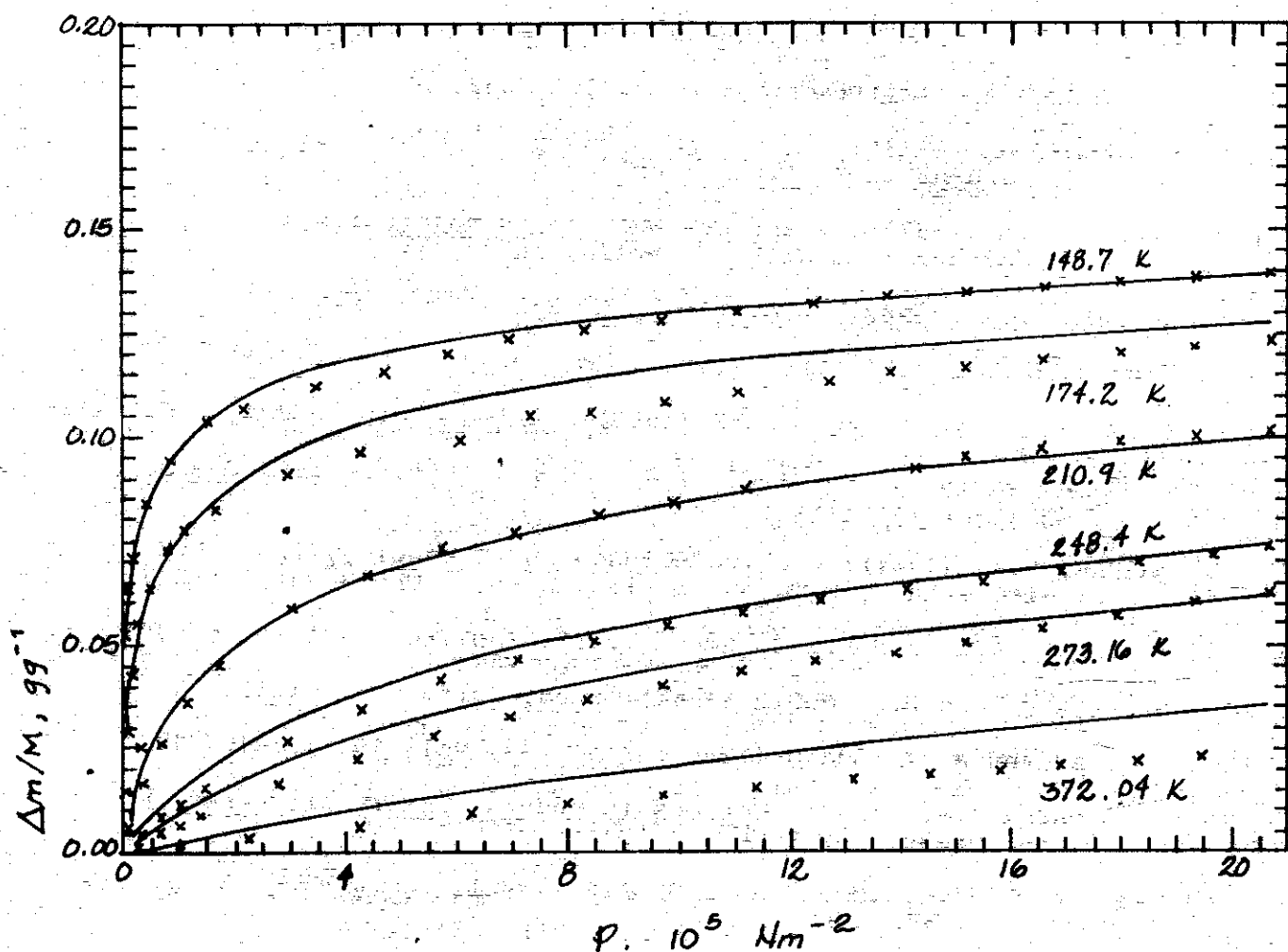


Figura 2. Isothermas de adsorción de N_2 sobre NaX.
 Puntos experimentales (x).
 Ajuste teórico (línea continua).

VI. REFERENCIAS

- [1] MEIER, W.M. and D.M. OLSON (1978): Atlas of Zeolite Structure Type, IZA Special Publication, Butterworth, Washington.
- [2] MORTIER, W.J. (1982): Compilation of Extra Framework Sites in Zeolites, Butterworth, Washington.
- [3] BRECK, D.W. (1974): Zeolite Molecular Sieves, Wiley-Interscience, New York, ch 2.
- [4] BAKAEV, V.A. (1966): Dokl. Akad. Nauk, SSSR 167, p. 369.
- [5] RUTHVEN, D.M. (1971): Nature Phys. Sci. 232, p. 70.
- [6] SCHIRMER, W. (1979): Preprints Workshop on Adsorption of Hydrocarbons in Zeolites, Berlin, p. 1.
- [7] BARRER, R.M. (1979): Preprints Workshop on Adsorption of Hydrocarbons in Zeolites, Berlin, ch 3.
- [8] RUTHVEN, D.M. (1982): Zeolites 2, p. 242.
- [9] SOTO, J.L. and A.L. MYERS (1981): Mol. Phys., 42, p. 971.
- [10] CRUZ, J. DE LA; C. RODRÍGUEZ (1989): Surface Science 209, p. 215-228.
- [11] CRUZ, J. DE LA; C. RODRÍGUEZ y R. ROQUE (1988): Revista Cubana de Física, VIII(1): 39-45.
- [12] BARRER, R.M. (1984): Zeolite Science and Technology, Eds. F.M. Ribeiro et al., NATO ASI Series, Nijhof, The Hague, p. 227.
- [13] RICHARDS, R.E. and L.V.C. REES (1988): Zeolites, vol. 8, p. 35.
- [14] MÜLLER, U. and K.K. UNGER (1988): Stud. Surf. Sci. Catal., 101.
- [15] PAN, D. and A. MERSMANN (1990): Zeolites, Vol. 10, p. 210-212.
- [16] TYABLIKOV, S.V. (1967): Methods in Quantum Theory of Magnetism, Plenum Press, New York.
- [17] Yang, L.C.; T.D. VO and H.H. BURRIS (1982): Cryogenics 22, p. 625.