

TEMAS A REFORMAR EN LA ENSEÑANZA DE LA FÍSICA

F. Herrmann, Departamento de Didáctica de la Física, Universidad de Karlsruhe.

RESUMEN

Se compara el desarrollo del saber científico con la evolución de sistemas biológicos. Tal como cada sistema biológico inevitablemente contiene fósiles el currículo de la Física contiene conceptos obsoletos. Se argumenta que existe un gran potencial para la simplificación de la enseñanza de la ciencia. Se presentan varios ejemplos de conceptos obsoletos en la Física.

ABSTRACT

The development of scientific knowledge is compared with the evolution of biological systems. Just as every biological system inevitably contains fossils the physics syllabus contains obsolete concepts. It is argued that the potential for simplifying the teaching of science by eliminating these historical burden is high. Several examples for obsolete concepts in physics are given.

INTRODUCCIÓN

El conjunto del saber científico está aumentando, mientras el tiempo del qué disponemos para la enseñanza queda sin cambiar. Por consiguiente, para dar a cada nueva generación de estudiantes una idea general de lo que se considera lo esencial de la ciencia contemporánea, es preciso procesar el saber científico de alguna manera. En general el problema se soluciona por la especialización. Los estudiantes aprenden el núcleo de la Física de una manera más general e inevitablemente más superficial, y profundizan su conocimiento en una de las especialidades de la Física: la Física de los plasmas, la Física de las partículas elementales, la Física de las nano-estructuras...

Sin embargo, aparte de la especialización hay otra manera de remediar el mal, por lo menos parcialmente.

En este artículo se argumentará que el saber científico comprende un gran potencial de simplificación.

En la sección 2, comparemos el proceso de crecimiento del saber físico con la evolución de sistemas biológicos. Una consecuencia de esta evolución es que el sistema es muy conservador y comprende rodeos congelados. Contiene temas que se pueden comparar con relictos en sistemas biológicos.

Después, en la sección 3, se exponen algunos ejemplos de estos conceptos obsoletos, o "cargas históricas" [1].

2. La evolución del saber científico

En cierto sentido, el crecimiento del saber científico es similar a la evolución de sistemas biológicos. En ambos tipos de sistemas existen *generaciones*. El profesor es miembro de una generación. Antes de transmitir el contenido de la Física a los jóvenes miembros de otra generación él mismo lo tiene que aprender. Sin embargo, entre aprender y transmitir, el saber científico padece cambios. Por un lado, el profesor va tener en cuenta nuevos resultados de la investigación científica. Por otro lado, puede ocurrir que introduce errores. Estos cambios se pueden comparar con las *mutaciones* de la genética.

En general, los cambios y mejoramientos que un profesor está realizando sólo se refieren a su especialidad, mientras que la estructura general de la ciencia será transmitido sin alteraciones. Esto significa que el saber básico no está expuesto a la misma *presión selectiva* que los desarrollos más recientes. Hechos descubiertos o desarrollados recientemente serán agregado a los temas más antiguos sin cuestionar el antiguo núcleo. En la teoría de la evolución este fenómeno existe también y se llama *prolongación*.

Una consecuencia es que una reestructuración o remodelación de la ciencia se vuelve cada vez más difícil. La fuerza motriz para un cambio es cada vez más débil. En otros términos: Cuanto más complejo es un sistema en proceso de evolución, tanto más conservador será. Por esta razón, el saber científico refleja su propio desarrollo histórico.

Cada estudiante tiene que reproducir este desarrollo histórico. El proceso de aprendizaje individual procede a menudo hasta en los mínimos detalles por la misma vía que el desarrollo de la

ciencia entera. Esta observación nos recuerda una regla que cualquier estudiante de biología tiene que aprender: La ley biogenética de Ernst Haeckel según la cual *la ontogénesis recapitula la filogénesis*, la evolución embrionaria se semeja a la evolución de la especie.

Observamos entonces la fenómeno siguiente: Los rodeos que forzosamente tomó el desarrollo del saber científico se conservan. Así ideas que en un contexto más largo se revelan superfluas o inapropiadas pueden ser mantenidas. Un estado transitorio del desarrollo histórico puede sobrevivir como *fósil viviente*, como los genetistas suelen llamar a este fenómeno. Incluso sobreviven errores aparentes. Así, estudiando los contenidos actuales de la Física podemos aprender mucho sobre la historia de la Física. De hecho, se puede realizar una auténtica arqueología de esta manera.

La transición de la ciencia hacia un estado de cada vez mayor rigidez es un proceso inevitable y normal. No es una acusación osada decir que la ciencia es innecesariamente complicada. Si estamos diciendo que la ciencia está en un estado imperfecto, no pretendemos decir que los científicos han sido incompetentes. Las personas que en su época trabajaron para el avance de la ciencia hicieron lo que había que hacer. Igual como un relicto de la evolución biológica en un tiempo remoto cumplió una función importante, muchos componentes de la ciencia, que hoy día resultan superfluos u obsoletos, desempeñaron un papel indispensable en el pasado.

He aquí el potencial simplificador que mencionamos antes. Proponemos entonces buscar rodeos históricos y temas obsoletos y eliminarlos del currículo.

Se nos ocurren dos objeciones posibles respecto a esta propuesta.

Primero, se podría opinar, que el recorrido histórico es el más natural y el más eficiente del punto de vista de la psicología del aprendizaje. "¿No es este recorrido, que la comunidad científica ha seguido inicialmente, el que corresponde al método más fácil también para el individuo?" Según nuestro parecer no es así. Los ejemplos que vamos a presentar muestran que a menudo un concepto sencillo ha sido descubierto pasando por estados intermedios muy complicados. Solamente al final se notó que hubiera habido un atajo.

Y la segunda objeción hipotética: "La historia de la ciencia es un tema de la enseñanza tan importante como los mismos contenidos físicos. Por esta razón vale la pena seguir el recorrido histórico." Sin embargo, lo que estamos haciendo en general no es la enseñanza de la historia de la Física. Enseñar la historia de la ciencia significa analizar esta historia y

reflexionar sobre ella. No basta repasar ciegamente el camino histórico.

Durante muchos años, en nuestro grupo de trabajo, hemos buscado sistemáticamente temas contenidos en los currículos o programas de la Física, que se pueden considerar como temas obsoletos, superfluos o inapropiadamente presentados. Con el tiempo la vista para estos fenómenos se le vuelve a uno muy aguda, y se está descubriendo cada vez más ejemplos [2].

1. Ejemplos

La exposición de cada uno de los ejemplos está estructurado de la misma manera.

Primero, introducimos *el tema*. Citaremos algún libro típico o resumimos una afirmación en su forma más típica, sin comentar. Nunca vamos a mencionar la fuente, ya que nuestro objetivo no es poner en la picota algún autor o libro en particular.

Después discutiremos lo que, según nuestra opinión, es lo inconveniente en este tema o esta afirmación, o por qué es inapropiado su presentación: *el defecto*.

A continuación, intentaremos de explicar *el origen* de la inconsistencia. En efecto, en la mayoría de los ejemplos se puede observar, que en un tiempo anterior, el tema o su presentación, era justificado y apropiado.

En último lugar, se hace una propuesta de como se puede deshacer del mal: *el remedio*.

3.1 Acciones a distancia

El tema. La enseñanza de la mecánica suele empezar con la mecánica Newtoniana y, por consiguiente, con la vista Newtoniana del mundo físico. Una propiedad esencial de esta vista es la existencia de fuerzas: Decimos que un cuerpo A ejerce una fuerza sobre otro cuerpo B.

El defecto. Esta vista está basada en la existencia de acciones a distancia, ya que no se menciona el rol que desempeña el sistema que está mediando la fuerza. Sin embargo, desde el gran éxito de la primera teoría del campo, la teoría de Maxwell, la comunidad científica está convencida de que el concepto de acción a distancia no es apropiado para la descripción de interacciones mecánicas.

El origen. Al mismo Newton no le gustó este aspecto de su teoría. Pero el tiempo aún no era maduro para una descripción local.

El remedio. Mencionemos consecuentemente el sistema que está mediando la fuerza.

3.2 Las leyes de Newton

El tema. Las tres leyes de Newton.

El defecto. Según el punto de vista de la física contemporánea, todas las tres leyes no son otra cosa que la expresión de la conservación del momentum. La primera y la tercera declaran esta conservación para dos situaciones particulares. Esto se ve muy claramente, cuando se expresan estas leyes mediante corrientes de momentum. En efecto, la fuerza no es otra cosa que otra palabra para una corriente de momentum [3-5]. Así, se pueden traducir las tres leyes como sigue:

1. El momentum de un cuerpo permanece constante en tanto que no existe una corriente de momentum que entra al cuerpo, o que sale del cuerpo.
2. El cambio del momentum con el tiempo, es decir dp/dt , es igual a la corriente de momentum que fluye hacia el cuerpo:

$$dp/dt = F$$

3. Cuando una corriente de momentum está fluyendo entre dos cuerpos A y B, la intensidad de la corriente FA que entra en A es igual a la intensidad FB de la corriente que sale de B.

El origen. Para Newton sus tres leyes le parecieron independientes, porque eran parte de una red bastante complicada de definiciones y observaciones.

El remedio. En una presentación consecuente como teoría local, tenemos que interpretar la fuerza como corriente de impulso o momentum. Si así lo hacemos, notaremos que las leyes de Newton se pueden reemplazar por la afirmación: El momentum es una magnitud que se conserva.

3.3 Formas de energía

El tema. La energía se nos presenta en diversas formas: cinética y potencial, eléctrica y química, calor, trabajo y muchos más.

El defecto. A pesar de que estamos hablando a menudo de formas de energía, entramos en problemas, cuando tenemos que definirlos. A veces, no somos consecuentes en la distinción de la clasificación de energía almacenada y de flujos de energía. Hay físicos que no son capaces de explicar porque no es correcto decir que la energía está almacenada en forma de calor. Algunos Físicos profesionales entran en dificultades cuando se les pregunta, qué parte de la energía de un resorte o de una molécula de oxígeno es mecánica, térmica, química, eléctrica, magnética, cinética, potencial,

ordenada o desordenada. Clasificar la energía en formas es sencillamente superfluo, y en los casos donde podría tener cierta utilidad y un significado claro, hay métodos más apropiados para distinguir los sistemas o procesos considerados [6].

El origen. Cuando el concepto de energía fue introducido en la Física a mediados del siglo 19, hablar de formas de energía era una cosa muy natural y casi inevitable, porque la nueva magnitud tenía una propiedad única: la de no tener ninguna propiedad. No se conocía ninguna propiedad idónea para reconocer el contenido en energía de un sistema, independientemente del sistema particular. No se conocía ningún método general para medir la energía contenida en un sistema. Resultó entonces natural decir de esta magnitud que se manifiesta en diversas formas: a veces por una alta velocidad, a veces por una alta temperatura, otras veces por una alta tensión mecánica, etc. Ciertas máquinas o ciertos artefactos fueron llamados, consecuentemente, convertidores o transformadores de energía. Sin embargo, este estado particular duró solamente medio siglo. En 1905, con la publicación de la teoría de la relatividad especial, se reveló que la energía no es una magnitud tan misteriosa como parecía antes. Ya que energía y masa no son otra cosa que dos nombres distintos para la misma magnitud, la energía tiene propiedades bien definidas: las mismas que ya conocíamos de la masa, es decir peso e inercia. Por consiguiente, se puede medir y reconocer la energía en todos los sistemas por el mismo método, en principio por lo menos.

El remedio. Seamos parsimoniosos con los adjetivos después de la palabra energía.

3.4 Estructuras comunes

El tema. Las diversas ramas de la Física tienen estructuras distintas. Se utilizan distintas descripciones matemáticas y distintos modelos. Un ejemplo lo representan la mecánica, la electricidad y la termodinámica.

El defecto. Se podrían presentar los tres campos mencionados de tal manera que resulta una gran similitud entre ellos. Si en cada caso se pone en el centro una magnitud extensiva característica y la magnitud intensiva conjugada, se ve aparecer una analogía de las estructuras matemáticas. Las magnitudes extensivas son el momentum para la mecánica, la carga eléctrica para la electrodinámica y la entropía para la termodinámica. Las magnitudes intensivas correspondientes son la velocidad, el potencial eléctrico y la temperatura absoluta, respectivamente. Una manifestación de esta analogía es que en cada uno de los tres campos existe un transporte de energía particular, y para cada uno vale una expresión de la misma estructura.

Tenemos:

$$P = v \cdot F$$

para un transporte mecánico de energía (por medio de una correa de transmisión por ejemplo). El flujo de energía por medio de un cable eléctrico se puede calcular así:

$$P = U \cdot I$$

Y una corriente de energía por un conductor térmico está relacionada con la corriente de entropía IS y la temperatura:

$$P = T \cdot IS.$$

Otro ejemplo que muestra como funciona la analogía es la descripción de procesos disipativos.

En un proceso disipativo mecánico, es decir un proceso con roce mecánico, el momentum siempre está trasferido del cuerpo con mayor velocidad al cuerpo de menor velocidad. La carga eléctrica fluye del potencial eléctrico más alto al potencial más bajo y la entropía fluye espontáneamente de la temperatura mayor a la menor.

Estos son solamente dos entre muchos otros ejemplos que muestran, que el proceso de enseñanza puede ser simplificado aprovechando esta analogía.

El origen. Las diversas partes de la Física se han desarrollado independientemente. La semejanza mencionada se ha vuelto aparente solamente a finales del siglo 19.

El remedio. Remodelación de la Física, pero esto es una operación de mucha envergadura [7].

3.5 Materiales magnéticos

El tema. Intoduciendo el magnetismo de la materia, generalmente se empieza con la histéresis.

El defecto. Los estudiantes de Física e incluso profesionales de la Física saben notablemente menos sobre la magnetoestática que de la electrostática, a pesar de que las fuerzas magnéticas que podemos experimentar en la vida cotidiana son más fuertes que las fuerzas electrostáticas. Una de las razones es que el magnetismo de la materia sin falta se introduce por el efecto de histéresis. La impresión que se impone es que el comportamiento de un imán está determinado esencialmente por este efecto complicado. Sin embargo, para muchos materiales ferromagnéticos modernos, y en particular los materiales que se utilizan para la fabricación de los muchos imanes alrededor de nosotros, el rol de la histéresis es casi nulo. Estos

imanes tienen una magnetización constante la que reciben en el proceso de fabricación y en condiciones normales no se nota nada de histéresis. Evidentemente se puede exponer un imán a un campo externo tan fuerte que la magnetización imprimida va a cambiar. Pero al introducir el ferromagnetismo es razonable prescindir de estos efectos, tal como se prescinde de desviaciones de la ley de Hooke cuando la estamos introduciendo [8].

El origen. Solamente 50 años atrás, no se hubiera podido enseñar el ferromagnetismo sin referencia a la histéresis. Los materiales que eramos capaces de fabricar eran lejos de lo que se puede llamar "magnéticamente duro". Era muy fácil cambiar la magnetización de un llamado imán permanente de esta época.

El remedio. Empezar el tema con la consideración dos tipos de materiales magnéticos ideales:

- los magnéticamente duros, que tienen magnetización fija;
- los magnéticamente blandos que acomodan su magnetización de tal manera que la intensidad del campo en su interior siempre será cero.

3.6 La potencia

El tema. La magnitud P , la energía por tiempo, se llama potencia.

El defecto. El valor de esta magnitud siempre se refiere a una superficie. Es una medida de la energía atravesando esta área por tiempo. Un nombre más sugestivo sería *corriente o flujo de energía*. Este nombre sería de acuerdo con los nombres de varias otras magnitudes análogas: corriente eléctrica, corriente de masa.

El origen. Fue acuñado en una época cuando todavía no se podía localizar la energía.

El remedio. Llamar a P "corriente de energía" en vez de "potencia".

3.7 La dilatación térmica de materiales líquidos y sólidos

El tema. En la enseñanza de la termodinámica dedicamos bastante tiempo a la discusión de la dilatación térmica de cuerpos sólidos y de líquidos. Intentamos justificar la importancia del tema con la consideración de la dilatación de puentes y de los rieles de los ferrocarriles.

El defecto. Es un efecto del orden de 10 a la menos cuatro, y de efectos de esta magnitud hay muchísimos. Hay efectos netamente mayores en magnitud y en importancia que no tratamos, porque

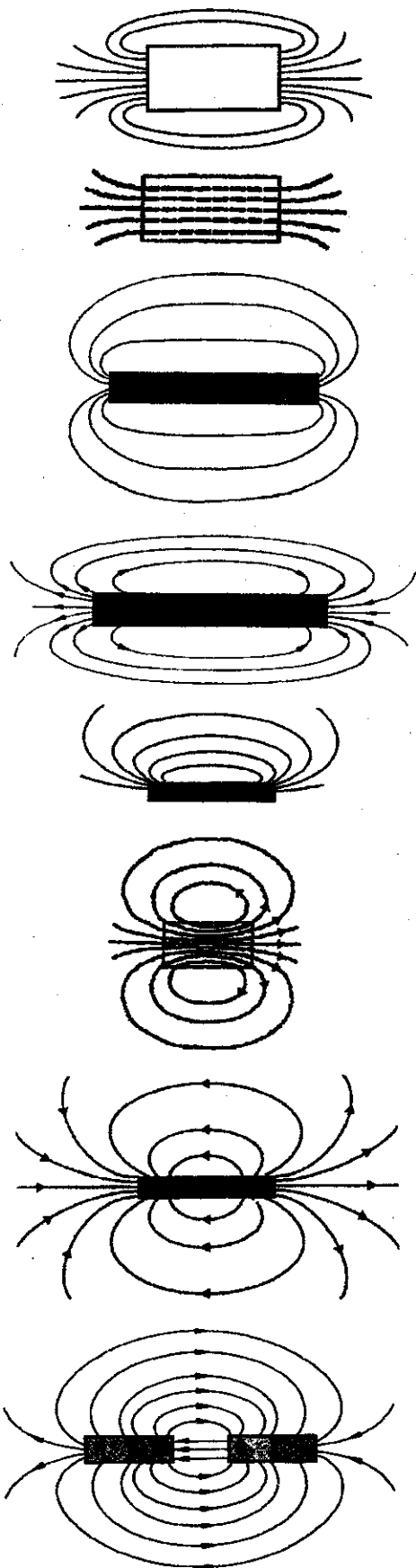


Figura 1. Dibujos de las líneas de campo de un imán de barra sacados de libros de la escuela secundaria. Ninguno de los dibujos es correcto.

no tenemos el tiempo necesario. Además, explicamos porque se dilatan los puentes, pero sería lógico explicar también, porque las casas y las calles adyacentes no se dilatan. Además, hoy día las vías ferreas ya no se dilatan.

El origen. El efecto era importantísimo cuando la unidad de la temperatura era basada en la dilatación térmica del mercurio. Sin embargo desde mucho tiempo ya no es legal esta definición.

El remedio. Renunciemos del tema, y discutamos efectos más importantes, por lo menos en las clases introductorias.

El campo del imán permanente

El tema. Dibujos o imágenes de las líneas de campo de un imán permanente en forma de barra se encuentran en la mayoría de libros de texto de Física.

El defecto. Hemos considerado todos los libros a nuestro alcance. Las imágenes mencionadas eran incorrectas en todos los libros de escuela secundaria, figura 1. En algunos libros todas las líneas salen de las superficies de los lados extremos, es decir donde se encuentran los polos. En realidad salen también en los lados de la barra, ver la figura 2, que muestra las líneas de campo correctamente. (Esta figura está sacada de un libro de universidad.) Algunos autores parecen pensar además, que las líneas tienen que estar perpendicular a la superficie del imán. En algunas ejemplos de la figura 1 hay líneas que salen de las superficies laterales del imán pero su orientación respecto a la superficie es incorrecta.

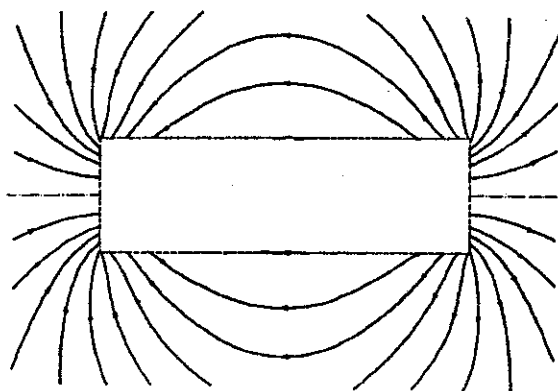


Figura 2. Dibujo correcto de las líneas de campo de un imán de barra.

El origen. Probablemente los errores son debido al desprecio muy común de la magnitud intensidad del campo magnético H .

El remedio. Se podría pensar que basta con hacer los dibujos correctos. Sin embargo, el problema es más delicado [8].

3.8 .El clima marítimo y el clima continental

El tema. Algunos libros atribuyen la diferencia entre el clima marítimo y el clima continental al calor específico. El calor específico del agua es mayor que el de la tierra.

El defecto. La explicación no es correcta. La diferencia es debido a la diferencia en la conducción térmica, que en el caso del agua es mucho más eficaz, debido a la convección. Así en verano el calor penetra en una capa más profunda en el agua, comparado con la tierra firme.

El origen. La explicación errónea es plausible. Evidentemente, no todo lo que es plausible, también es correcto. Encontramos también libros con la explicación correcta. Es notable la coexistencia entre una explicación correcta y otra errónea.

El remedio. Explicar el efecto correctamente.

4. Conclusión

Intentamos de mostrar que gran parte de lo que se considera los contenidos esenciales e imprescindibles del currículo ha entrado en los libros gracias a coincidencias históricas. De esto se desprende que hay un gran potencial para la simplificación del currículo.

Para localizar conceptos obsoletos es preciso una actitud que se podría caracterizar como irrespetuosa. Efectivamente, es una falta de respeto, pero es falta de respeto hacia convicciones que se desarrollaron por mera costumbre o dejadez. De ningún modo es falta de respeto ante los logros de los científicos que idearon un concepto en su tiempo.

Probablemente, algunos lectores no están de acuerdo con nosotros en todos los puntos. Tal vez, opinan que lo que en nuestro juicio es un concepto obsoleto no merece este calificativo. Sin embargo, nuestra intención no era, de convencer a cada uno de que cada uno de nuestros ejemplos es un fósil. Lo que sí era nuestra intención era mostrar que tales temas existen y que están entre los temas que todo el mundo considera como fundamentales.

REFERENCIAS

- [1] HERRMANN, F., JOB, G.(1996): "The historical burden on scientific knowledge". *Eur. J. Phys.* **17**, 159-163
- [2] HERRMANN, F., JOB, G. (1994-2000): *Altlasten der Physik*. Columna en la revista *Physik in der Schule*. El primer artículo apareció en *Physik in der Schule* **32**, 322. Hasta esta fecha aparecieron más de 50 artículos. Se publicarán también en nuestro sitio Internet: www.physik.uni-karlsruhe.de/~didaktik/
- [3] PLANCK, M. (1908): "Bemerkungen zum Prinzip der Aktion und Reaktion in der allgemeinen Dynamik". *Phys. Z.* **9**, 828-830
- [4] HERRMANN, F., SCHMID, G. B. (1984): "Statics in the momentum current picture". *Am. J. Phys.* **52**, 146-152
- [5] HERRMANN, F., SCHMID, G. B. (1985): "Analogy between mechanics and electricity". *Eur. J. Phys.* **6**, 16-21
- [6] FALK, G., HERRMANN, F., SCHMID, G. B. (1983): "Energy forms or energy carriers?". *Am. J. Phys.* **51**, 1074-1077
- [7] HERRMANN, F. (1998): *Der Karlsruher Physikkurs* (Köln: Aulis Verlag). (Curso para la escuela secundaria. Existe también una versión CD-ROM. El CD-ROM contiene una traducción al castellano de los capítulos más importantes del curso. Gratuito para pedidos desde países de América Latina. Pedir por correo electrónico a <didaktik@tfp.physik.uni-karlsruhe.de>)
- [8] HERRMANN, F. (1991): "Teaching the magnetostatic field: Problems to avoid". *Am. J. Phys.* **59**, 447 - 452

PRINCIPIO DE HUYGENS PARA LAS ONDAS PLANAS MONOCROMÁTICAS Y DIFRACCIÓN POR UNA ABERTURA CIRCULAR

J. Romero, O. Calzadilla y L. Hernández. Facultad de Física. Universidad de La Habana.
Colina Universitaria. 10400 La Habana, Cuba.

RESUMEN

Como es conocido para el estudio de la difracción es usual utilizar las aproximaciones de Fresnel y Fraunhofer, en dependencia de la distancia a la cual se está realizando la observación. En el uso de la aproximación de Fresnel se tiene que introducir el factor de oblicuidad que complica grademente la solución analítica del problema. En general, resulta de gran dificultad para el estudiante determinar la región de trabajo, de campo lejano o campo cercano. En el presente trabajo se estudia la distribución de intensidades luminosas a lo largo del eje de una abertura circular debido a la difracción en ella. Para realizar dicho estudio no se ha recurrido a ninguna de las aproximaciones tradicionales: Fresnel o Fraunhofer. Sólo se ha tenido en cuenta el Principio de Huygens-Fresnel, complementado con la teoría de Kirchhoff, para aplicarlo a la difracción en una abertura circular de un frente de onda plano. Las soluciones que se obtienen son analíticas. El resultado ha permitido por primera vez obtener una función analítica para la distribución de la intensidad luminosa a lo largo del eje desde la abertura hasta el infinito, en función de : la longitud de onda incidente, el radio de la abertura y la distancia de observación.

ABSTRACT

As it is known in order to study diffraction, Fresnel and Fraunhofer's approximations are employed. When you use Fresnel's you have to introduce the obliquity factor, which complicates a lot the problem. It is difficult for the students to determine the working region, whether it is a distant field or not. In this work the distribution of light intensity trough the circular hole axis when diffraction occurs is studied. None of the traditional approximations are used. We have only taken into account the Huygens-Fresnel Principle, in addition to Kirchhoff's theory to solve the problem with plane waves. Analytical solutions are obtained. The result allowed for the first time to obtain an analytical function for the distribution of the light intensity in the axis from the aperture to the infinite depending on incident wavelength, aperture's radio and observation distance.

INTRODUCCIÓN

La teoría de Fresnel, unida al principio de Huygens, permitió por primera vez calcular la intensidad de la luz difractada en un punto del espacio. Sin embargo, el modelo fue insuficiente porque se tuvo que introducir un factor de oblicuidad con el fin de describir la dirección de las emisiones secundarias. Fresnel mismo reconoció la necesidad de introducir un parámetro de este tipo, pero lo único que hizo fue conjeturas acerca de su expresión analítica. Los resultados de su teoría arrojaron incongruencias. La fundamental que se encontró, fue que la energía por unidad de área de las ondas secundarias, es igual a la energía por unidad de longitud de la onda primaria, dividida entre la longitud de onda de la radiación. Este resultado no puede ser explicado físicamente. La otra incongruencia es que las ondas secundarias se deberían emitir con un retardo de fase de $\pi/2$ en relación con la onda primaria. Otro resultado sin explicación física. Posteriormente, Kirchhoff utilizando las funciones de Green, encontró una expresión para las ondas esféricas monocromáticas.

En el presente trabajo se exponen los resultados generales, correspondientes a la formulación matemática del principio de Huygens para ondas planas monocromáticas. Para ilustrar la importancia de esta formulación, se muestra la utilización de la misma en el cálculo de la intensidad de la luz difractada por una abertura circular. Además, con el objetivo de simplificar, nos limitamos a exponer los resultados correspondientes al cálculo sólo sobre el eje normal al plano que contiene a dicha abertura y que pasa por su centro. Hay que señalar también, que a diferencia de las formulaciones anteriores, la presente se aborda de forma vectorial y sin recurrir a aproximaciones.

Razones, como son las de orden lógico y formal, influyeron para dividir el trabajo en dos partes. La primera corresponde a un breve comentario sobre la deducción de la expresión del diferencial del vector del campo eléctrico. Dicha deducción, se hizo sobre la base del mencionado principio y con ayuda de una identidad matemática, la cual se obtuvo a partir de las funciones de Green. O sea, esta identidad permite expresar el principio de Huygens

matemáticamente, con su ayuda se encuentra la expresión del diferencial del vector del campo eléctrico. En la segunda parte se determina la expresión del vector del campo eléctrico correspondiente a la difracción por la abertura, así como la intensidad de este campo. Seguido se hace un análisis de los resultados obtenidos, comparándolos con los de la teoría de Fresnel. Para finalizar, se muestran y se discuten las gráficas de intensidad relativa en función de la distancia a la abertura dividido el radio de la misma. Aquí hay que mencionar, que la posición de los máximos y de los mínimos de intensidad, así como la cantidad de extremos que se obtienen, coinciden con los del modelo de Fresnel. Además, como podrá verse posteriormente, se obtiene por primera vez una fórmula analítica donde se evidencia con toda claridad, que la intensidad del máximo disminuye en la medida en que se encuentra más cerca del orificio difractante, mientras que la intensidad del mínimo aumenta en iguales condiciones.

1- PRINCIPIO DE HUYGENS

Supongamos que tenemos un frente de onda plano con fase α , que en el instante inicial, se encuentra a la distancia R de un punto p . Además, consideremos que a partir de dicho instante el frente se mueve acercándose a p . El vector del campo eléctrico de una onda plana monocromática, cuyo frente de onda de fase α cumple con las consideraciones antes hechas, puede expresarse a través de la relación 1.1. Aquí ω es la frecuencia de oscilación del vector del campo eléctrico y k es el módulo del vector de onda $\vec{k}$, $\vec{r}$ es el vector que localiza el punto de observación p respecto a un punto de referencia cualquiera (o) y $\vec{r}'$ localiza los puntos sobre el frente de onda respecto a la misma referencia (fig. 1.1).

$$\vec{E}_p(\vec{r}, t) = \vec{E}_o(t) e^{i(\omega t + \vec{k}(\vec{r}' - \vec{r}) + \alpha)} \quad 1.1$$

Según el principio de Huygens, cada punto de un frente de onda se comporta como una fuente emisora de ondas secundarias de igual frecuencia y longitud de onda que la primaria, con la particularidad de que las ondas secundarias avanzan con la misma velocidad de la onda primaria en cada punto. Para ondas planas monocromáticas,

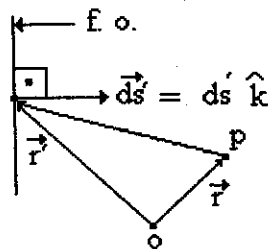


fig. 1.1

este principio se expresa matemáticamente a través de la fórmula que aparece a continuación.

$$d\vec{E}_p(\vec{r}', t) = \left(d\vec{s}' \times \vec{E}_p(\vec{r}, t) e^{i\vec{k}(\vec{r}' - \vec{r})} \right) \times \frac{\vec{r}' - \vec{r}}{|\vec{r}' - \vec{r}|} \frac{\partial}{\partial |\vec{r}' - \vec{r}|} \left(\frac{e^{ik|\vec{r}' - \vec{r}|}}{2\pi |\vec{r}' - \vec{r}|} \right) \quad 1.2$$

Esta relación es consecuente con el principio de Huygens, expresa como influye cada fuente secundaria sobre cualquier punto p del espacio.

2- DIFRACCIÓN POR UNA ABERTURA CIRCULAR

Con el objetivo de ilustrar la importancia de la relación 1.2, procedemos a realizar el cálculo del campo de difracción de una onda plana monocromática, sobre el eje de simetría axial de la abertura circular difractante. Supongamos que tenemos una onda plana monocromática incidiendo de forma normal sobre un plano opaco y que este está dotado de una abertura circular de radio ρ . Coloquemos el origen de coordenadas o sobre el centro de la abertura y tomemos el eje z en la dirección y sentido de $\vec{k}$. Si queremos determinar el vector del campo eléctrico de la onda difractada, habrá que integrar la relación 1.2 por el área s de la abertura. Aquí nos concretaremos a realizar el cálculo sobre el eje z (fig. 2.1).

Teniendo en cuenta que $\vec{k}(\vec{r}' - \vec{r}) = -kz$ y llamando R a $|\vec{r}' - \vec{r}|$, el vector del campo eléctrico de la onda difractada podrá expresarse a través de la relación 2.1.

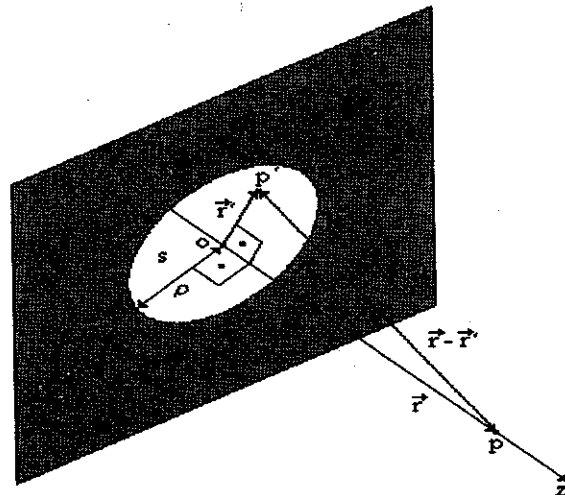


fig. 2.1

$$\vec{E}(z, t) = (\hat{e}_z \times \vec{E}_p(z, t) e^{-ikz}) \times \int_s \frac{\vec{r}' - z\hat{e}_z}{2\pi R} \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{e^{ikR}}{R} \right) ds' \quad 2.1$$

Calculando en esta última el valor de la integral por la abertura obtenemos el vector del campo eléctrico.

$$\vec{E}(z, t) = \vec{E}_p(z, t) \left[1 - \frac{z e^{ik(\sqrt{\rho^2 + z^2} - z)}}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} \right] \quad 2.2$$

La intensidad luminosa la calculamos determinando el módulo al cuadrado del vector del campo eléctrico.

$$I(z, t) = I_0 \left[1 + \frac{z^2}{z^2 + \rho^2} - \frac{2z}{\sqrt{z^2 + \rho^2}} \cos(k(\sqrt{z^2 + \rho^2} - z)) \right] \quad 2.3$$

La condición de máximos y la condición de mínimos se obtienen de la relación anterior y se expresan a través de las ecuaciones 2.4 y 2.5 respectivamente.

$$k(\sqrt{z^2 + \rho^2} - z) = (2n + 1)\pi \quad 2.4$$

$$k(\sqrt{z^2 + \rho^2} - z) = 2n\pi \quad 2.5$$

Si hacemos la aproximación $n\lambda \ll z$, entonces se pueden obtener las expresiones 2.6 y 2.7 para la posición de los máximos y los mínimos respectivamente.

$$z \approx \frac{\rho^2}{\lambda(2n + 1)} \quad 2.6$$

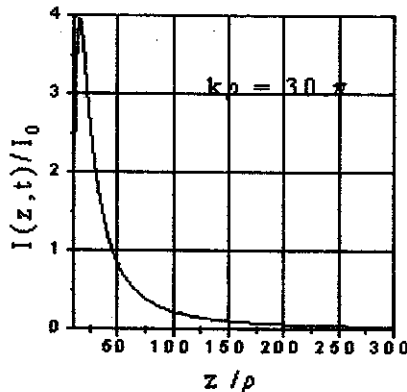
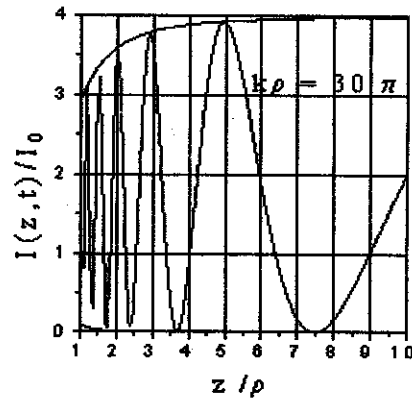
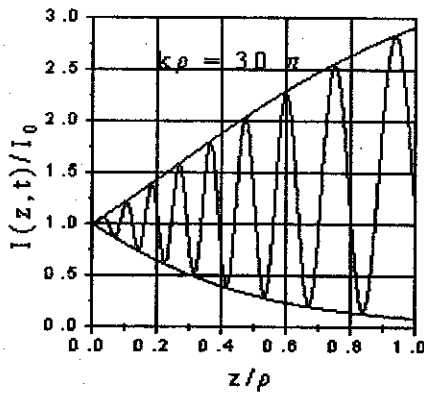
$$z \approx \frac{\rho^2}{2n\lambda} \quad 2.7$$

Estas relaciones son idénticas a las que se obtienen en la teoría de Fresnel. Al final pueden verse gráficos del comportamiento de la intensidad relativa (I/I_0) en función de z/ρ para $k\rho = 30\pi$, además, se han graficado las envolventes de la curva.

Como puede apreciarse en las gráficas la intensidad del máximo disminuye en la medida en que se encuentra más cerca del orificio difractante, mientras que la intensidad del mínimo aumenta en iguales condiciones.

CONCLUSIONES

Sin apelar a aproximación alguna y con la ayuda de resultados matemáticos exactos, se obtuvo una expresión analítica (la relación 1.2) que es consecuente con el principio de Huygens. Dicha relación permitió por primera vez, calcular rigurosamente el campo de difracción de una onda plana monocromática sobre el eje de simetría axial de la abertura circular difractante.



EL SIGNO DEL CALOR Y LA DIRECCIÓN DE PROCESOS LINEALES EN DIAGRAMAS PRESIÓN-VOLUMEN

E. M. Larramendi y O. de Melo

Facultad de Física, Universidad de La Habana. Colina Universitaria. Ciudad de la Habana, Cuba.

RESUMEN

Una formulación general de los procesos lineales en el diagrama PV para gases ideales permite comprender muchas características de este tipo de transformaciones. En particular, un interesante comportamiento del calor específico y el signo del calor es observado para $P = mV + n$ (m, n constantes) con $m < 0$. Un simple análisis cualitativo en este caso puede llevar a errores y contradicciones aparentes en las bases físicas. Se abordan procesos con calor específico negativo, raramente tratados en los libros de texto. Además se plantea una forma sencilla para determinar el sentido (signo) del calor en un proceso lineal.

ABSTRACT

A general formulation of linear processes in PV-diagrams for ideal gases allows understanding many features of this kind of transformations. In particular, an interesting behavior of the specific heat and the sign of the heat is observed in $P = mV + n$ (m, n constants) with $m < 0$. A simplistic qualitative analysis in this case can lead mistake and contradictions as it is stressed in this work. We point processes with negative specific heat, hardly mentioned in text book.

INTRODUCCIÓN

Cálculos sobre calor, trabajo y eficiencias de ciclos son temas muy frecuentes en los cursos de Física Molecular en el nivel de Física General. Estos cálculos son esenciales para la comprensión de la primera y la segunda Ley de la termodinámica. Generalmente el caso de gases ideales es considerado por simplicidad, pero aun en estos casos, la determinación cualitativa del signo de el calor (aspecto importante para la solución de los problemas de clases) no siempre es evidente. De hecho, Dickerson y Mottmann¹ encontraron respuestas erróneas (en prestigiosos libros de textos) de un problema que involucra procesos lineales con pendiente negativa en el diagrama - PV. Ellos analizaron este caso, enfatizando en la aparente contradicción con la segunda ley de la termodinámica.

En este trabajo derivamos una formulación general del calor específico para procesos lineales en el diagrama - PV. Relevantes casos son analizados. Para motivar un análisis más profundo del tema, hagamos la siguiente pregunta: ¿Pueden existir procesos lineales donde el calor sea nulo? Una respuesta cualitativa pudiera ser: "en cualquier proceso lineal el gas realiza trabajo (excepto en el proceso isocórico, en el cual evidentemente el trabajo es nulo); la temperatura varía continuamente (excepto para procesos isotérmicos en los que el calor no es nulo y lógicamente no es un proceso

lineal). Luego los cambios de la energía interna y el trabajo deben estar balanceados para hacer el calor nulo". ¿Pero, que condiciones son necesarias para que esto se cumpla?

II. CALOR ESPECÍFICO PARA PROCESOS PV LINEALES. DISCUSIÓN DE CASOS DIFERENTES

El calor específico molar se puede escribir como:

$$c = c_V + \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + P \right] \frac{dV}{dT} \quad (1)$$

donde c es el calor específico, U la energía interna, V , P y T usualmente representan el volumen, la presión y la temperatura. Para el gas ideal,

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T = 0 \quad \text{y} \quad c_V = \frac{i}{2} R$$

luego

$$c = \frac{i}{2} R + P \frac{dV}{dT}$$

el término dV/dT se determina de la función $P(V)$. En el caso de procesos lineales

$P = mV + n$, y tomando en cuenta la ecuación de estado del gas ideal (para 1 mol):

¹ R.H. Dickerson and J. Mottmann, "On the thermodynamic efficiencies of reversible cycles with sloping straight-line processes", Am. J. Phys. 62, 558-562 (1994)

$$RT = mV^2 + nV \Rightarrow \frac{dT}{dV} = \frac{2mV + n}{R} \Rightarrow \frac{dV}{dT} = \frac{R}{2mV + n} \quad (2)$$

usando las ecuaciones 3 y 2 tenemos:

$$c = \frac{i+2}{2}R - \frac{R}{2 + \frac{n}{mV}} \quad (3)$$

Teniendo en cuenta esta ecuación podemos analizar tres casos:

Caso I. ($m \geq 0$; $n > 0$). Estos procesos pueden ocurrir para cualquier valor de V . Fig 1a muestra el comportamiento de T , P y c en este caso. El calor específico es siempre positivo pero decrece con el aumento del volumen hasta un valor asintótico. El signo del calor solo depende del sentido del proceso, por ejemplo: si el volumen aumenta, el calor es absorbido y viceversa. Una idea cualitativa de este comportamiento es simple: al incrementarse el volumen el gas realiza trabajo, al mismo tiempo que la temperatura se incrementa (el proceso va hacia las isothermas de mayor temperaturas), y por la primera ley de la termodinámica, el calor debe ser absorbido por el sistema. El caso de $m=0$ (Fig. 1b)

es un típico proceso isobárico: P y c son constantes y T varía linealmente con el volumen.

Caso II. ($m > 0$; $n \leq 0$). También en este caso el sentido del calor depende del sentido del proceso. Esto es debido a que el calor es siempre positivo. La diferencia con el caso I es que en este caso el calor específico aumenta con el volumen (Fig. 1c), pero para $V \rightarrow \infty$ toman el mismo valor $c_{\infty} = (i+1)R/2 = (c_p + c_v)/2$. Un interesante caso es cuando $n = 0$, en este caso del proceso es politrópico para cualquier valor de m (Fig. 1d), $c = c_{\infty}$ y el índice politrópico es -1 .

Caso III. ($m < 0$; $n > 0$). Este es el caso mas interesante. En procesos con esta características no es posible tener el sentido del calor. Esto no solamente depende del sentido del proceso, sino también del valor del volumen. Análisis simplista de este tipo de procesos, en este sentido, puede deberse a errores y contradicciones aparentes. Cuando la presión disminuye con un incremento del volumen, por simple inspección no se conoce si la temperatura aumenta o disminuye. De la Fig. 2 se puede ver que existe un valor del volumen ($V_T = n/2m$) en que el signo del diferencial de la temperatura cambia. Para valores del volumen

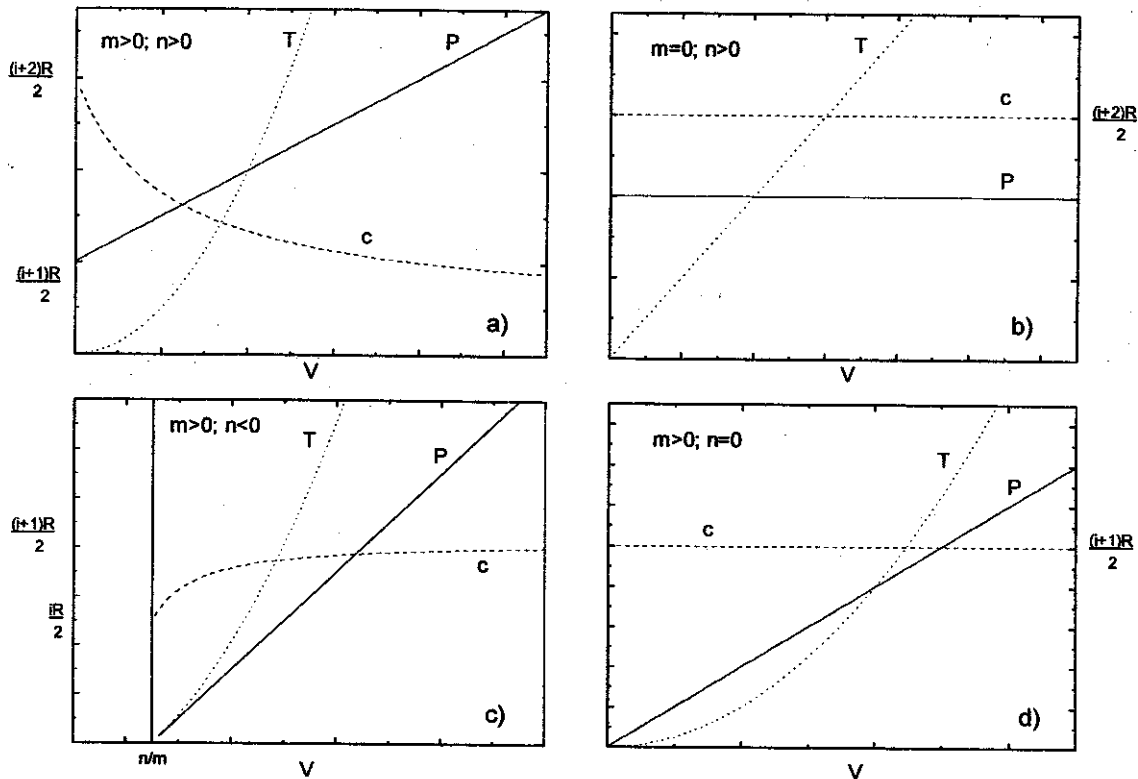


Fig. 1. Comportamiento de la temperatura T , presión P y el calor específico c como función del volumen para un proceso lineal del tipo $P=mV+n$ con a) $m>0$ y $n>0$; b) $m=0$ y $n>0$; c) $m>0$ y $n<0$; d) $m>0$ y $n=0$. (Los valores colocados en el eje vertical corresponden al calor específico).

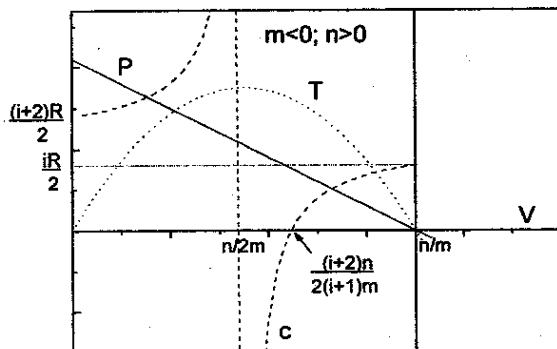


Fig. 2. Como en la Fig. 1 pero para $m < 0$ y $n > 0$. El volumen donde el signo del diferencial de la temperatura cambia es $V_T = n/2m$. El volumen donde el signo del calor específico cambia también se muestra.

menor que $n/2m$ la temperatura aumenta con el decrecimiento de la presión, lo contrario ocurre cuando el volumen es mayor que V_T . El calor específico aumenta hasta V_T , donde se hace infinito. Desde V_T hasta $V_S = (i+2)n/2(i+1)m$ el calor específico se hace negativo. Para volúmenes mayores que V_S el calor específico es positivo. Considerando el signo de la variación de la temperatura y el del calor específico, podemos analizar el signo (sentido) del calor usando la expresión diferencial $\delta q = cdt$. Una descripción cualitativa del signo de dT , c y δq es mostrada en la parte inferior de la Fig. 3. Se puede ver que el calor cambia de signo en $V_S = (i+2)n/2(i+1)m$. Para este proceso, en sentido del aumento de volumen, el calor primeramente es absorbido y luego desprendido por el gas.

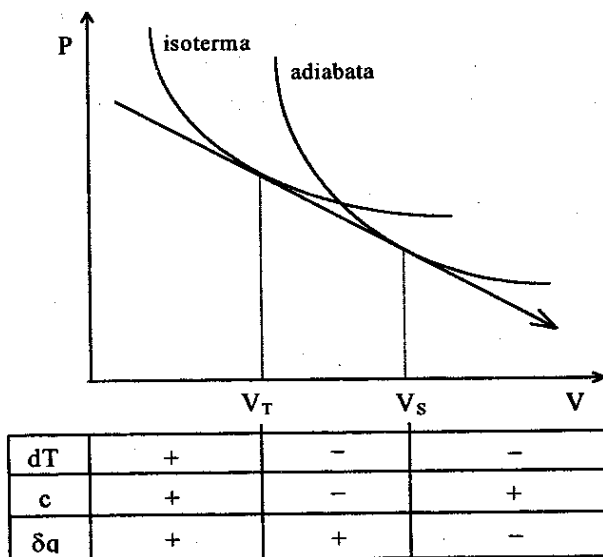


Fig. 3. Proceso lineal AB en un diagrama PV (arriba). La isoterma y la adiabat tangentes al proceso también se muestran. El calor es absorbido por el gas para $V < V_S$ y desprendido para $V > V_S$.

El valor del volumen donde el signo de dT cambia puede ser visualizado en un diagrama PV como el punto en que el proceso lineal es tangente a una isoterma. De hecho para un proceso isotérmico:

$$PV = \text{const} \Rightarrow \frac{dP}{dV} = -\frac{\text{const}}{V^2}$$

considerando que una isoterma es tangente al proceso lineal en V_T :

$$\text{const} = V_T(n - mV_T) \quad \text{y} \quad -\frac{\text{const}}{V_T^2} = -m$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones obtenemos que $V_T = n/2m$ como se esperaba. También se puede probar con argumentos similares que el valor de volumen en que el calor cambia de signo es donde el proceso lineal es tangente a una adiabat en el diagrama PV. Para un proceso adiabático considerando un gas ideal:

$$\text{const} = V_S^\gamma (n - mV_S);$$

$$-\text{const} \cdot \gamma V_S^{-(\gamma+1)} = -m$$

y

$$\text{const} = V_S^\gamma (n - mV_S) \quad \text{y} \quad -\text{const} \cdot \gamma V_S^{-(\gamma+1)}$$

Finalmente se obtiene:

$$V_S = \frac{n\gamma}{m(\gamma+1)} = \frac{(i+2)n}{2(i+1)m}$$

El conocimiento de este punto es necesario para cálculos correctos de la eficiencia de ciclos que involucre procesos lineales de pendiente negativa. Bucher² hace una discusión de la determinación gráfica de este punto.

Podemos pensar en un proceso de este tipo en que su calor total sea nulo. Las condiciones de tales procesos pueden ser obtenidas usando:

$$\delta q = c dT = \left[\frac{i+2}{2} R + \frac{mVR}{n-2mV} \right] dV \quad (4)$$

de la ecuación (2):

$$dT = (n - 2mV) \frac{dV}{R}$$

sustituyendo en la ecuación (4) obtenemos:

$$\delta q = \left[\frac{i+2}{2} n - (i+1)mV \right] dV$$

² M. Bucher, "Gráfical determination of heat reversal along a linear PV process", Am. J. Phys. 67, 93 (1999)

En esta ecuación $\delta q/dV$ es una función impar con cero en V_s . Luego, cualquier proceso que comience y termine en estados simétricos con respecto a V_s tendrá su calor total nulo. Las tres regiones interesantes son: I) desde $V=0$ hasta $V=V_T$ (la temperatura aumenta y el calor específico es positivo); II) desde $V=V_T$ hasta $V=V_s$ (la temperatura disminuye y el calor específico es negativo); III) desde $V=V_s$ hasta $V=-n/2m$ (la temperatura disminuye y el calor específico es positivo). Estas regiones y sus relaciones con la isoterma y la adiabata tangentes al proceso lineal son mostradas esquemáticamente en la Fig. 3 para un proceso AB.

III. CONCLUSIONES

Una ecuación general para el calor específico en procesos lineales fue deducida. El problema del signo del calor, en relación a la dirección del proceso, se puede analizar fácilmente utilizando $\delta q = c dT$, con características distintivas halladas en el caso de procesos lineales con pendiente negativa. Como ha sido indicado en un trabajo anterior, estas características son ignoradas en problemas de clase.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen las útiles sugerencias del Profesor Medel Pérez Quintana (Facultad de Física, Universidad de La Habana)

REFERENCIAS

1. Dickenson, R.H and J. Mottmann, (1994): "On the thermodynamic efficiencies of reversible cycles with sloping straight-line processes", Am. J. Phys. **62**, 558-562
2. Bucher M., (1999): "Graphical determination of heat reversal along a linear PV process", Am. J. Phys. **67**, 93

EL SIGNO DEL CALOR Y LA DIRECCIÓN DE PROCESOS LINEALES EN DIAGRAMAS PRESIÓN-VOLUMEN

E. M. Larramendi y O. de Melo

Facultad de Física, Universidad de La Habana. Colina Universitaria. Ciudad de la Habana, Cuba.

RESUMEN

Una formulación general de los procesos lineales en el diagrama PV para gases ideales permite comprender muchas características de este tipo de transformaciones. En particular, un interesante comportamiento del calor específico y el signo del calor es observado para $P = mV + n$ (m, n constantes) con $m < 0$. Un simple análisis cualitativo en este caso puede llevar a errores y contradicciones aparentes en las bases físicas. Se abordan procesos con calor específico negativo, raramente tratados en los libros de texto. Además se plantea una forma sencilla para determinar el sentido (signo) del calor en un proceso lineal.

ABSTRACT

A general formulation of linear processes in PV-diagrams for ideal gases allows understanding many features of this kind of transformations. In particular, an interesting behavior of the specific heat and the sign of the heat is observed in $P = mV + n$ (m, n constants) with $m < 0$. A simplistic qualitative analysis in this case can lead mistake and contradictions as it is stressed in this work. We point processes with negative specific heat, hardly mentioned in text book.

INTRODUCCIÓN

Cálculos sobre calor, trabajo y eficiencias de ciclos son temas muy frecuentes en los cursos de Física Molecular en el nivel de Física General. Estos cálculos son esenciales para la comprensión de la primera y la segunda Ley de la termodinámica. Generalmente el caso de gases ideales es considerado por simplicidad, pero aun en estos casos, la determinación cualitativa del signo de el calor (aspecto importante para la solución de los problemas de clases) no siempre es evidente. De hecho, Dickerson y Mottmann¹ encontraron respuestas erróneas (en prestigiosos libros de textos) de un problema que involucra procesos lineales con pendiente negativa en el diagrama - PV. Ellos analizaron este caso, enfatizando en la aparente contradicción con la segunda ley de la termodinámica.

En este trabajo derivamos una formulación general del calor específico para procesos lineales en el diagrama - PV. Relevantes casos son analizados. Para motivar un análisis más profundo del tema, hagamos la siguiente pregunta: ¿Pueden existir procesos lineales donde el calor sea nulo? Una respuesta cualitativa pudiera ser: "en cualquier proceso lineal el gas realiza trabajo (excepto en el proceso isocórico, en el cual evidentemente el trabajo es nulo); la temperatura varía continuamente (excepto para procesos isotérmicos en los que el calor no es nulo y lógicamente no es un proceso

lineal). Luego los cambios de la energía interna y el trabajo deben estar balanceados para hacer el calor nulo". ¿Pero, que condiciones son necesarias para que esto se cumpla?

II. CALOR ESPECÍFICO PARA PROCESOS PV LINEALES. DISCUSIÓN DE CASOS DIFERENTES

El calor específico molar se puede escribir como:

$$c = c_V + \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T + P \right] \frac{dV}{dT} \quad (1)$$

donde c es el calor específico, U la energía interna, V , P y T usualmente representan el volumen, la presión y la temperatura. Para el gas ideal,

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T = 0 \quad \text{y} \quad c_V = \frac{i}{2} R$$

luego

$$c = \frac{i}{2} R + P \frac{dV}{dT}$$

el término dV/dT se determina de la función $P(V)$. En el caso de procesos lineales

$P = mV + n$, y tomando en cuenta la ecuación de estado del gas ideal (para 1 mol):

¹ R.H. Dickerson and J. Mottmann, "On the thermodynamic efficiencies of reversible cycles with sloping straight-line processes", Am. J. Phys. 62, 558-562 (1994)

$$RT = mV^2 + nV \Rightarrow \frac{dT}{dV} = \frac{2mV + n}{R} \Rightarrow \frac{dV}{dT} = \frac{R}{2mV + n} \quad (2)$$

usando las ecuaciones 3 y 2 tenemos:

$$c = \frac{i+2}{2}R - \frac{R}{2 + \frac{n}{mV}} \quad (3)$$

Teniendo en cuenta esta ecuación podemos analizar tres casos:

Caso I. ($m \geq 0$; $n > 0$). Estos procesos pueden ocurrir para cualquier valor de V . Fig 1a muestra el comportamiento de T , P y c en este caso. El calor específico es siempre positivo pero decrece con el aumento del volumen hasta un valor asintótico. El signo del calor solo depende del sentido del proceso, por ejemplo: si el volumen aumenta, el calor es absorbido y viceversa. Una idea cualitativa de este comportamiento es simple: al incrementarse el volumen el gas realiza trabajo, al mismo tiempo que la temperatura se incrementa (el proceso va hacia las isothermas de mayor temperaturas), y por la primera ley de la termodinámica, el calor debe ser absorbido por el sistema. El caso de $m=0$ (Fig. 1b)

es un típico proceso isobárico: P y c son constantes y T varía linealmente con el volumen.

Caso II. ($m > 0$; $n \leq 0$). También en este caso el sentido del calor depende del sentido del proceso. Esto es debido a que el calor es siempre positivo. La diferencia con el caso I es que en este caso el calor específico aumenta con el volumen (Fig. 1c), pero para $V \rightarrow \infty$ toman el mismo valor $c_{\infty} = (i+1)R/2 = (c_p + c_v)/2$. Un interesante caso es cuando $n = 0$, en este caso del proceso es politrópico para cualquier valor de m (Fig. 1d), $c = c_{\infty}$ y el índice politrópico es -1 .

Caso III. ($m < 0$; $n > 0$). Este es el caso mas interesante. En procesos con esta características no es posible tener el sentido del calor. Esto no solamente depende del sentido del proceso, sino también del valor del volumen. Análisis simplista de este tipo de procesos, en este sentido, puede deberse a errores y contradicciones aparentes. Cuando la presión disminuye con un incremento del volumen, por simple inspección no se conoce si la temperatura aumenta o disminuye. De la Fig. 2 se puede ver que existe un valor del volumen ($V_T = n/2m$) en que el signo del diferencial de la temperatura cambia. Para valores del volumen

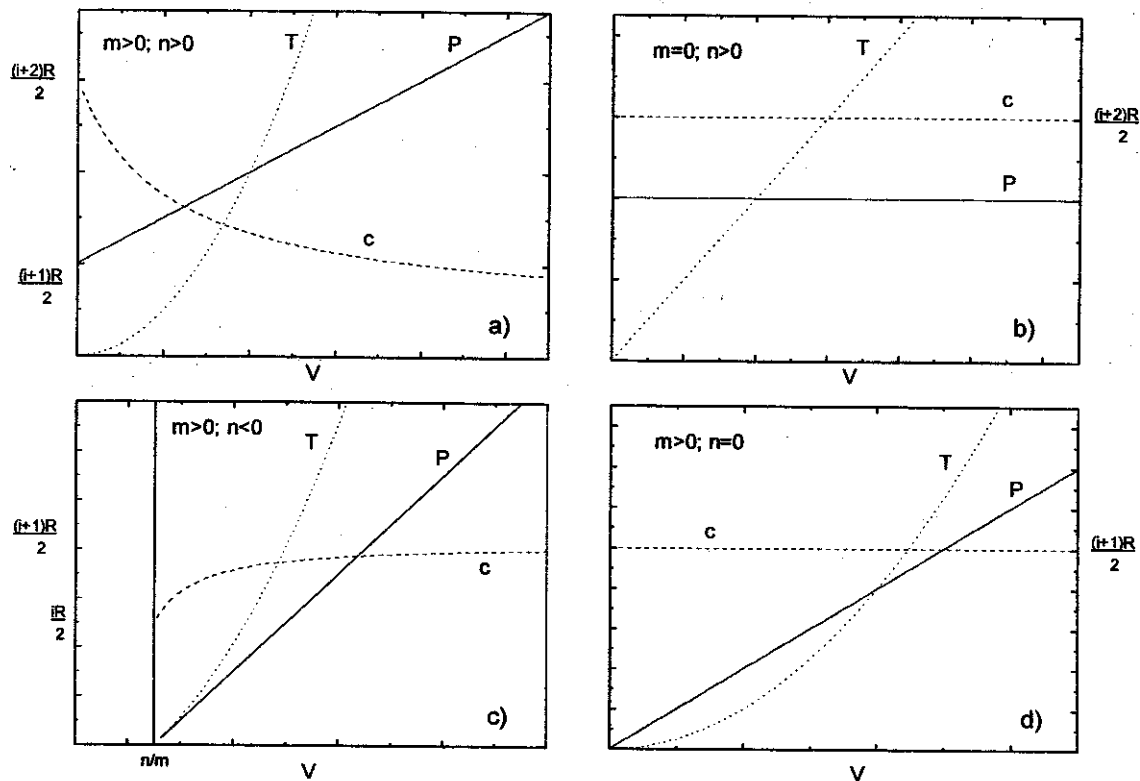


Fig. 1. Comportamiento de la temperatura T , presión P y el calor específico c como función del volumen para un proceso lineal del tipo $P=mV+n$ con a) $m>0$ y $n>0$; b) $m=0$ y $n>0$; c) $m>0$ y $n<0$; d) $m>0$ y $n=0$. (Los valores colocados en el eje vertical corresponden al calor específico.

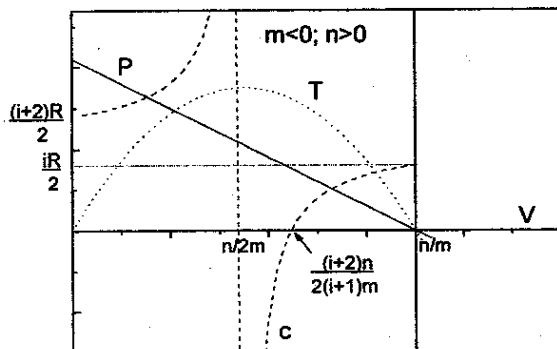


Fig. 2. Como en la Fig. 1 pero para $m < 0$ y $n > 0$. El volumen donde el signo del diferencial de la temperatura cambia es $V_T = n/2m$. El volumen donde el signo del calor específico cambia también se muestra.

menor que $n/2m$ la temperatura aumenta con el decrecimiento de la presión, lo contrario ocurre cuando el volumen es mayor que V_T . El calor específico aumenta hasta V_T , donde se hace infinito. Desde V_T hasta $V_S = (i+2)n/2(i+1)m$ el calor específico se hace negativo. Para volúmenes mayores que V_S el calor específico es positivo. Considerando el signo de la variación de la temperatura y el del calor específico, podemos analizar el signo (sentido) del calor usando la expresión diferencial $\delta q = cdt$. Una descripción cualitativa del signo de dT , c y δq es mostrada en la parte inferior de la Fig. 3. Se puede ver que el calor cambia de signo en $V_S = (i+2)n/2(i+1)m$. Para este proceso, en sentido del aumento de volumen, el calor primeramente es absorbido y luego desprendido por el gas.

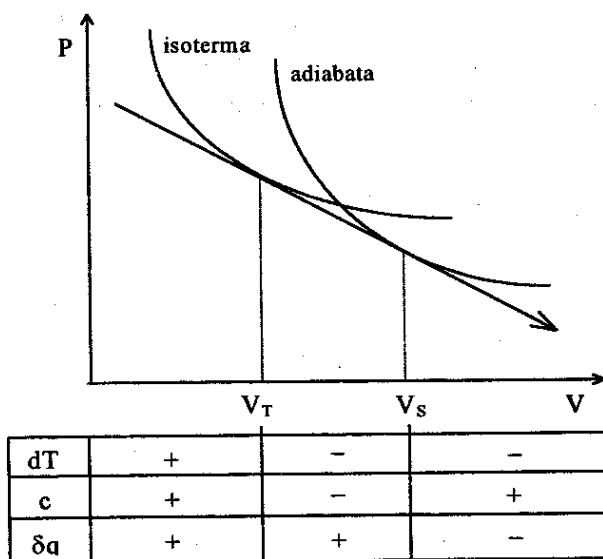


Fig. 3. Proceso lineal AB en un diagrama PV (arriba). La isoterma y la adiabata tangentes al proceso también se muestran. El calor es absorbido por el gas para $V < V_S$ y desprendido para $V > V_S$.

El valor del volumen donde el signo de dT cambia puede ser visualizado en un diagrama PV como el punto en que el proceso lineal es tangente a una isoterma. De hecho para un proceso isotérmico:

$$PV = \text{const} \Rightarrow \frac{dP}{dV} = -\frac{\text{const}}{V^2}$$

considerando que una isoterma es tangente al proceso lineal en V_T :

$$\text{const} = V_T(n - mV_T) \quad \text{y} \quad -\frac{\text{const}}{V_T^2} = -m$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones obtenemos que $V_T = n/2m$ como se esperaba. También se puede probar con argumentos similares que el valor de volumen en que el calor cambia de signo es donde el proceso lineal es tangente a una adiabata en el diagrama PV. Para un proceso adiabático considerando un gas ideal:

$$\text{const} = V_S^\gamma (n - mV_S);$$

$$-\text{const} \cdot \gamma V_S^{-(\gamma+1)} = -m$$

y

$$\text{const} = V_S^\gamma (n - mV_S) \quad \text{y} \quad -\text{const} \cdot \gamma V_S^{-(\gamma+1)}$$

Finalmente se obtiene:

$$V_S = \frac{n\gamma}{m(\gamma+1)} = \frac{(i+2)n}{2(i+1)m}$$

El conocimiento de este punto es necesario para cálculos correctos de la eficiencia de ciclos que involucre procesos lineales de pendiente negativa. Bucher² hace una discusión de la determinación gráfica de este punto.

Podemos pensar en un proceso de este tipo en que su calor total sea nulo. Las condiciones de tales procesos pueden ser obtenidas usando:

$$\delta q = c dT = \left[\frac{i+2}{2} R + \frac{mVR}{n-2mV} \right] dV \quad (4)$$

de la ecuación (2):

$$dT = (n - 2mV) \frac{dV}{R}$$

sustituyendo en la ecuación (4) obtenemos:

$$\delta q = \left[\frac{i+2}{2} n - (i+1)mV \right] dV$$

² M. Bucher, "Grafical determination of heat reversal along a linear PV process", Am. J. Phys. 67, 93 (1999)

En esta ecuación $\delta q/dV$ es una función impar con cero en V_s . Luego, cualquier proceso que comience y termine en estados simétricos con respecto a V_s tendrá su calor total nulo. Las tres regiones interesantes son: I) desde $V=0$ hasta $V=V_T$ (la temperatura aumenta y el calor específico es positivo); II) desde $V=V_T$ hasta $V=V_s$ (la temperatura disminuye y el calor específico es negativo); III) desde $V=V_s$ hasta $V=-n/2m$ (la temperatura disminuye y el calor específico es positivo). Estas regiones y sus relaciones con la isoterma y la adiabata tangentes al proceso lineal son mostradas esquemáticamente en la Fig. 3 para un proceso AB.

III. CONCLUSIONES

Una ecuación general para el calor específico en procesos lineales fue deducida. El problema del signo del calor, en relación a la dirección del proceso, se puede analizar fácilmente utilizando $\delta q = cdT$, con características distintivas halladas en el caso de procesos lineales con pendiente negativa. Como ha sido indicado en un trabajo anterior, estas características son ignoradas en problemas de clase.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen las útiles sugerencias del Profesor Medel Pérez Quintana (Facultad de Física, Universidad de La Habana)

REFERENCIAS

1. Dickenson, R.H and J. Mottmann, (1994): "On the thermodynamic efficiencies of reversible cycles with sloping straight-line processes", Am. J. Phys. **62**, 558-562
2. Bucher M., (1999): "Graphical determination of heat reversal along a linear PV process", Am.J Phys. **67**, 93

CURSO "ELECTRÓNICA PARA LA OPTICA".

V. Fajer y J.L. Díaz¹.

Centro de Desarrollo de Equipos e Instrumentos Científicos (CEDEIC).

RESUMEN

El presente curso está destinado a físicos y especialistas que requieren conceptos y herramientas básicas para aplicar en los experimentos, mediciones e investigaciones con instrumentos ópticos. Está compuesto de las siguientes partes: fotodetectores, dispositivos semiconductores con junturas, tubos fotomultiplicadores, celdas de Faraday, amplificadores sincronizados y polarímetros automáticos. Se inicia con las definiciones, clasificación y características generales de los fotodetectores y los criterios para su elección en las aplicaciones específicas. Se incluye una parte relativa a los diversos tipos de fotodiodos con sus características distintivas, se describen los fotomultiplicadores destacando su vigencia y gama de aplicaciones. Se describen las características de las celdas de Faraday empleadas como moduladores y el importante uso de los amplificadores sincronizados en los experimentos e instrumentos ópticos. Finalmente se analiza un polarímetro automático como instrumento óptico complejo donde se aplican los aspectos abordados en el curso. El curso incluye un conjunto de prácticas de laboratorio.

ABSTRACT

This course is devoted to physicists and specialists that need basic concepts and tools for applying in experiments, measurements and research with optical instruments. It is composed by the following parts: photodetectors, semiconductor devices, photomultiplier tubes, Faraday cells, lock-in amplifiers and automatic polarimeters. It is initiated defining and classifying the general characteristics of the photodetectors and selection criteria in specific applications. A part relative to the different type of photodiodes is included, the photomultipliers are also described emphasizing its applications. Faraday cells employed as modulators are described and the important use of the lock-in amplifiers in the experiments and optical instruments. Finally, an automatic polarimeter is analyzed as a complex optical instrument where there are applied the previous concepts of the course. Laborite practices are also included in the course.

INTRODUCCIÓN Y CONTENIDO

El hecho de la especificidad de los fotodetectores y los requisitos de los experimentos ópticos aconsejan un tratamiento diferenciado del aprendizaje de la electrónica destinada a estos fines. lo que constituye el objetivo fundamental del presente curso de postgrado. En las primeras conferencias se aborda el estudio de los fotosensores (Boropay, 1988), y los circuitos electrónicos típicos (Burr-Brown, 1987) de acoplamiento. De todo el universo de fotosensores (Melles-Griot, 1998) se dedica el estudio más profundo a dos tipos de uso muy difundido: los fotodiodos y los fotomultiplicadores electrónicos. En ambos casos se estudian fundamentalmente: sus características de explotación, sus circuitos equivalentes, los ruidos y señales y el acoplamiento con los circuitos electrónicos de elaboración y manipulación primaria de las señales (pre amplificador).

Del resto de los fotosensores se ha hecho una selección entre los más utilizados en la práctica actual y sobre ellos en la primera parte se hace una descripción breve. En todos los casos los aspectos más particulares de la física de funcionamiento se han omitido. En ocasiones, no obstante se ha hecho

necesario analizar brevemente algunas cuestiones de la física de funcionamiento necesarias para comprender algunas particularidades del dispositivo en cuestión.

Dos conferencias están dedicadas al estudio de los fotosensores de juntura (fotodiodos, fotoceldas, fototransistores, fototiristores, etc. (Hamamatsu, 1991)(ORIEL, 1997), e los cuales se estudiarán con más detalle los fotodiodos. Otras dos conferencias se dedican al estudio de los fotomultiplicadores electrónicos (Hamamatsu, 1998).

Los moduladores son dispositivos comúnmente empleados en las instalaciones experimentales e instrumentos ópticos debido a la necesidad del análisis de las señales luminosas mediante señales de corriente alterna para su traslado a circuitos electrónicos analógicos y digitales, esto permite seleccionar la frecuencia de trabajo más adecuada a la aplicación específica.

Entre los moduladores empleados en óptica se encuentran los interruptores mecánicos, los moduladores electroópticos como los que emplean el efecto Kerr y los moduladores magneto-ópticos como las celdas de Faraday. Debido a su simplicidad

¹ e-mail: cedeic@ceniai.inf.cu, vfajer@ff.oc.uh.cu

constructiva y su amplio espectro de aplicaciones concentraremos nuestro estudio en este tipo de modulador lo que constituye un importante objetivo de estudio

Una prioridad del curso lo constituye el estudio de los amplificadores sincronizados por su uso difundido en óptica, el mencionado estudio se expone en dos conferencias. El nombre "amplificador sincronizado" sugiere a muchos ingenieros un filtro de rastreo o un oscilador con la fase atada. Sin embargo, sería más apropiado asociar el amplificador a un demodulador sincrónico o a un detector sensible a la fase.

Realmente, el amplificador sincronizado(as) es un voltímetro especializado de C.A. que usa la demodulación sincrónica para medir la intensidad o fase de la señal, incluso bajo severas condiciones de ruido, esto es cuando la relación señal ruido se aproxima a 130 dB. Sensibilidad a plena escala de 10 nV o 0,1 pA son típicas. El instrumento puede ser utilizado en cualquier caso que la señal de interés pueda ser sincronizada con o derivada de una señal de referencia adecuada. La salida del as, un voltaje de CD sensible a la fase proporcional a la señal, está

disponible para registradores o para su procesamiento posterior. También puede utilizarse como señal de control en un servo-sistema de lazo cerrado.

Para observar la aplicación de los fotodetectores y de los circuitos estudiados en un instrumento óptico complejo se escogió un polarímetro automático para estos fines (Fajer, 1998). Los polarímetros son instrumentos que realizan la medición del giro del plano de polarización de la luz linealmente polarizada, después de atravesar una sustancia ópticamente activa. Esto les permite determinar la concentración de sustancias tales como glucosa, aceites esenciales y más de cien materias primas y productos farmacéuticos, siendo de gran utilidad en la industria azucarera, farmacéutica, en laboratorios clínicos (Fajer, 1989), (Fajer, 1996) y otras ramas del análisis químico y bioquímico.

En dos conferencias se presentan algunos de los circuitos electrónicos del polarímetro automático LASERPOL-101 desarrollados en el Centro de Desarrollo de Equipos e Instrumentos Científicos (CEDEIC) de Cuba. Este instrumento tiene como principio de trabajo el sistema magneto-óptico.

REFERENCIA

Boropay, E. P., Torpachev, P. A., (1988): Technica Fotometric Visokogo Amplitudnovo Razresheniya. Universitetskoe. Minsk (en ruso).

Burr-Brown P., (1987): Photodiode Monitoring with OPAMPS. The Handbook of linear IC Applications :192-201.

Fajer, V., N. Duarte, E. D'Angelo, O. Bravo y D Chao (1989): Automatic Polarimeter LASERPOL 1 with He-Ne Laser for urinary glucose. Revue roumaine de Physique. Nos. 7-9, tomo 34.

Fajer V., 1996: Laser polarimeters: Overview of recent developments, design and applications. Journal of laser applications 8, 43-53.

Fajer V., Duarte N., López J.C., Torres R., Colomé T., Combarro A., Díaz J.L., (1998) Electronic polarimeter. U K Patent. GB2286244A.

Hamamatsu, 1991: Photodiodes . Infrared detectors. CdS Photoconductive Cells

Hamamatsu, 1998: Photomultiplier Catalogue.

Melles-Griot, 1998: Optical Guide.

ORIEL, 1997: Light Sources, Monochromators, detection Systems. Vol II.

CURSO "LA POLARIMETRÍA AUTOMÁTICA Y SUS APLICACIONES EN LA INDUSTRIA"

V, Fajer, G, Cossío. Centro de Desarrollo de Equipos e Instrumentos Científicos (CEDEIC).

RESUMEN

El presente curso está destinado a elevar el conocimiento de físicos, químicos, bioquímicos, farmacéuticos y otros especialistas relacionados con las técnicas analíticas en los últimos avances de la polarimetría automática, sus aspectos esenciales y sus principales aplicaciones en la industria azucarera, farmacéutica y otras. Se describen los principales polarímetros existentes, sus características y principios de funcionamiento. Está concebido como un curso de postgrado que aborde aspectos básicos y otros complementarios que se adaptan a la especialidad e intereses de los que lo reciben y se incluyen prácticas de laboratorio donde se realizan mediciones con placas de cuarzo, soluciones de azúcar y otras sustancias.

ABSTRACT

The present course is devoted to increase the knowledge of physicists, chemists, biochemists, pharmacists and other specialists related to analytic techniques in the last advances of the automatic polarimeters, its basic aspects and main applications in the sugar, pharmaceutical and other industries. The main existent polarimeters, their characteristics and operation principles are described. It is conceived as a postgraduated course that approaches basic aspects and others complementary ones that adapt to the specialty and interests of those that receive it. Laboratory practices are included performing quartz control plates, solutions and other substances measurements.

INTRODUCCIÓN Y CONTENIDO

A partir de 1960 comenzó el desarrollo de los polarímetros automáticos, lo cual constituyó un salto cualitativo dentro de la polarimetría automática. Estos instrumentos aumentan la precisión y confiabilidad de las mediciones, permiten una mayor rapidez de operación y abren la posibilidad de automatizar algunas fases de la producción industrial.

En el curso se hace una leve referencia del desarrollo de la polarimetría hasta nuestros tiempos. Seguidamente se tratan los requisitos técnicos de los polarímetros sacarimétricos desde el punto de vista constructivo, los cuales se encuentran sujetos a recomendaciones internacionales tales como las correspondientes a la Comisión Internacional para la Unificación de los Métodos de Análisis Azucareros (ICUMSA) y la de la Organización Internacional de Metrología Legal (OIML).

A continuación se presentan 4 principios de trabajo de polarímetros fotoeléctricos representativos y se realiza una descripción de diagramas simplificados de los mismos (Goodall, 1991), (Fajer, 1998), (Fajer, 1999), (Korppi-Tommola, 1992). Cierta atención se dedica a las fuentes luminosas, considerando entre ellas los láseres de Helio-Neón, que inicialmente fueron introducidos con fines metroológicos en polarimetría y que hace más de una década han sido incorporados en instrumentos desarrollados en Cuba.

Por su importancia como medio de control o verificación se han tratado en detalles las características de las placas de cuarzo de control, recogiendo aspectos de interés relativos a las placas de cuarzo para ángulos pequeños.

Por su interés económico y metrológico se ha abordado el desarrollo histórico de la escala sacarimétrica señalando las últimas recomendaciones y acuerdos relativos para esta escala (Zander, 1982). La dispersión rotatoria del cuarzo y la sacarosa se exponen reflejando los resultados de trabajos recientes. Las correcciones por temperatura se consideran también en un tópico aparte, estas correcciones adquieren aun mayor importancia al disponer de equipos más sensibles y precisos. Por último se plantean las tendencias de desarrollo de los polarímetros automáticos desde el punto de vista instrumental (Chen, 1993), (Grisham, 1993), (Rosenzweig, 1993).

Se ha llevado a cabo una exhaustiva revisión de las memorias del ICUMSA, cuyas recomendaciones rigen internacionalmente las normas que deben cumplirse en los laboratorios de los centrales azucareros y de los centros de exportación de azúcar. El presente curso pretende constituir una vía de actualizarse en las técnicas polarimétricas.

Se incluyen aspectos relacionados con la aplicación de las técnicas polarimétricas en la industria farmacéutica, en especial se describe la

metodología para el control de materia prima, materia prima de otros productos farmacéuticos
proceso y producto terminado de la dextrosa, así como el manitol, gentamicina, kanamicina, entre
como otros procedimientos para el control de la otros.

PROGRAMA DE CLASES

Actividad No. 1.

Introducción. Antecedentes de la polarimetría sacarimétrica. Requisitos técnicos de los polarímetros automáticos.

Actividad No. 2.

Principios de medición empleados actualmente. Sucromat. Polamat S. Sacharomat IV. Rudolph

Actividad No. 3.

Principios de medición empleados (continuación). Bendix. Polartronic Universal. Laserpol.
Tubos polarimétricos.

Actividad No. 4.

Fuentes de luz. Lámparas incandescentes. Lámparas espectrales. Láser de He-Ne.

Actividad No. 5.

Placas de cuarzo de control. A) Placas de cuarzo convencionales. B) Placas de cuarzo para ángulos pequeños. C) Longitud de onda de referencia para el ajuste de placas de cuarzo de control.

Actividad No. 6.

Evaluación. Exposición y discusión oral de un tema seleccionado.

Actividad No. 7.

Punto 100 de la escala azucarera. A) La escala alemana o Ventzke. B) Versión de la Escala Internacional Azucarera (1900) según Herzfel-Schonrock. C) Versión de la Escala Internacional Azucarera (1900) según Bates-Jackson.

Actividad No. 8.

Correcciones por efecto de la temperatura. A) Efecto de la temperatura sobre los sacarímetros. B) Efecto de la temperatura sobre las placas de cuarzo de control. C) Efecto de la temperatura sobre los balones y tubos polarimétricos.

Actividad No. 9.

Correcciones por efectos de la temperatura (continuación). D) Efecto de la temperatura sobre la solución de azúcar y las impurezas asociadas con ella. E) Efecto de las diferentes temperaturas a las que se somete la solución de azúcar en las manipulaciones analíticas.

Actividad No. 10.

A) Dispersión rotatoria del cuarzo. B) Dispersión rotatoria de la sacarosa. C) Dispersión rotatoria de las soluciones técnicas de azúcar. D) Dispersión rotatoria de los vidrios flint pesados.

Actividad No. 11.

A) Tendencias de desarrollo de los polarímetros sacarimétricos. B) Empleo de microprocesadores para las tareas de mando y elaboración de los resultados de la medición.

Actividad No. 12.

Base de datos DATAPOL para productos farmacéuticos y de perfumería. Estructura y alcance de la base de datos, procedimiento para adquisición de la información.

Actividad No. 13.

Polarímetros láser desarrollados en Cuba y sus aplicaciones.

A) Polarímetros láser de la serie LASERPOL.

B) Dosificación de glucosa en orina. Aplicación en el análisis clínico.

C) Medición de productos farmacéuticos y de perfumería.

D) Control del proceso de producción de vinos.

Actividad No. 14.

Evaluación final. Exposición y discusión oral de un tema seleccionado.

ACTIVIDADES EXPERIMENTALES

Se realizarán mediciones en el LASERPOL 101M con Placas de cuarzo certificadas y disoluciones de sacarosa, dextrosa, fructosa y otras sustancias según el interés.

REFERENCIAS

- Chen, J. (1993): Some comments on NIR-polarimetry. Int. Sugar JNL, Vol. 95, No. 1129.
- Goodall, D. and D, Lloyd (1991): Optical apparatus and Method. USA Patent: 5,42,101.
- Fajer V., 1996: Laser polarimeters: Overview of recent developments, design and applications. Journal of laser applications 8, 43-53.
- Fajer, V., N, Duarte., J.C, López., R, Torres., T, Colomé., A, Combarro, J.L, Díaz.,(1998): Electronic polarimeter. U K Patent. GB2286244A.
- Fajer, V., W, Pineda., W, Mora, H, Fernández., N, Duarte., J.C, López., J. Chao., R. Paredes., (1999): Polarímetro LASERPOL 3M para la automatización de los laboratorios de los centrales azucareros. Revista Cubana de Física, Vol. 2, No. 2 .
- Grisham, J., F. Clarke., C. Christensen and J. Stensby., (1993): Modulated high sensitivity infrared polarimeter USA Patent: 5,210,417.
- Korppi-Tommola, Jovko A.R, (1992): A method and a polarimeter for measuring optical rotation of sugar and other optically active solutions. Patent G01N 21/21. PCT/F192/00017.
- Rodríguez, C.W., M. Martínez., S. Naranjo., R. De Armas., V. Fajer., O.L. Bravo., G.Cossío., J. Ravelo., (1999): Estimado de la interferencia debido a la actividad óptica de los carbohidratos no azúcares del jugo de caña. Memorias del evento TECNOLASER 97.
- Rosenzweig, Z., Yeung E., (1993): Laser based double-beam circular dichroism detector of liquid chromatography. Appl. Spectrosc., 47 (12): 2017-21.
- K. Zander.,(1982): Proc. ICUMSA, 18. Session, Dublin. Subject6.

LA ACTUALIZACIÓN DE LOS CURSOS DE FÍSICA GENERAL PARA INGENIERÍA: TENDENCIAS MUNDIALES.

Autor: Dra. Amparo Patiño Castro. Departamento de Física. Facultad de Ing. Eléctrica. ISPJAE.

RESUMEN

Se presentan las principales tendencias mundiales en la actualización de los contenidos de enseñanza de la disciplina Física General para Ingeniería. Ellas fueron obtenidas a partir del análisis de dos fuentes de información: libros de texto y programas de la disciplina en Universidades cubanas y extranjeras. Se concluyen las principales insuficiencias en el proceso de actualización de esta disciplina: el carácter no sistémico, la separación de la Física Clásica y la Física Moderna y la inadecuada relación de los enfoques de fundamentación y profesionalización.

ABSTRACT

Main world wide trends in updating General Physics Course for Engineering are presented. These trends are obtained from two information sources: textbook and programmes from Cuban and foreign universities. The most relevant insufficiencies in the updating process of these courses are concluded: non-systemic character, scission between Modern and Classic Physics and the inadequate connection between fundamental and professional approach.

INTRODUCCIÓN

El desarrollo científico técnico acelerado de las últimas décadas de este siglo y el papel tan importante que ha desempeñado la Física en el mismo ha planteado retos importantes a la Didáctica de esta Ciencia. Entre ellos, la necesidad de realizar una actualización de los contenidos de enseñanza del Curso de Física General impartido en distintas carreras universitarias que tenga en cuenta: los recientes descubrimientos y cambios conceptuales llevados a cabo en el campo de las Ciencias Físicas (1), la renovación del papel jugado por la enseñanza de la Física y la forma en que debe tributar a la formación de un profesional determinado, por ejemplo el ingeniero (2,3), la incorporación de los modos de pensar y de actuar de los científicos como parte del sistema de experiencias de la actividad creadora que conforma junto a los sistemas de conocimientos, de habilidades y de relaciones con el mundo, el contenido de enseñanza de toda Ciencia (4), etc.

En la década de los 20, la Ciencia Física experimentó un profundo cambio con el surgimiento de la Mecánica Cuántica. Nuevos campos de conocimientos se desarrollaron, entre ellos, la física de las partículas con sus grandes instalaciones experimentales.

El segundo cambio importante comienza alrededor de los años 70; el desarrollo de los ordenadores propició el nacimiento de una nueva rama, que algunos incluso clasifican como otra forma de "hacer

Ciencia": las simulaciones por ordenador (5). Con ellas, antiguas ramas de la Física se han modernizado y han surgido otras nuevas. De las primeras la más representativa es la Cosmología donde los ordenadores son ahora la base de casi todo cuanto elaboran los astrofísicos. De las segundas, se puede mencionar a la Física estadística de sistemas no equilibrados y en particular el Caos.

Resulta por tanto necesario, conocer en que medida y de que manera esos cambios se han reflejado en el proceso de enseñanza aprendizaje de la disciplina Física General para Ingeniería lo que conlleva a analizar cuales son las principales tendencias que en ese sentido se manifiestan a escala mundial.

1. Tendencias a partir de libros de texto

Desde hace ya varios años la American Institute of Physics (AIP) ha estado patrocinando una serie de reuniones de profesores e investigadores con el objetivo de tomar decisiones y acuerdos sobre las acciones a seguir para adaptar los cursos introductorios de Física (Cursos de Física General) a las nuevas exigencias. Como resultado de lo anterior, se han revisado, ampliado y readaptado en alguna medida una buena cantidad de libros "clásicos" de Física General.

Por todo lo anterior, para precisar las tendencias en la actualización de los contenidos de la disciplina Física General para Ingeniería, se ha considerado como fuente importante de información al respecto,

libros de texto que en la actualidad son de amplio uso en el extranjero y usados en cierta medida como bibliografía de consulta en nuestro país para ese tipo de enseñanza, (6,7,8,9).

Es evidente que a pesar de las diferencias conceptuales y metodológicas entre textos y programas, los primeros deben reflejar con visión futurista el posible desarrollo o perfeccionamiento de los segundos aunque sea sólo por razones comerciales. Por tanto, un análisis de las tendencias en la actualización de contenidos en los textos permite tener una prospectiva sobre los programas.

De acuerdo con los análisis efectuados (10) se manifiestan las siguientes tendencias:

1. Aumento creciente de los contenidos relacionados con la Física Moderna. Mientras que en la década del 60 muchos textos aún no incluían la Física Moderna y otros lo hacían en una magnitud mínima la mayoría de los textos de los años 90 dedican entre un 15 a un 25% de su extensión a estos contenidos. Este incremento se refleja fundamentalmente en tres direcciones:

- Tratamiento más completo de temas tales como Mecánica Cuántica, Física del Átomo y Física del Núcleo incluyendo nuevos fenómenos y modelos.
- Inclusión de nuevos temas tales como Física de las moléculas y del sólido, Cosmología, Partículas fundamentales Sistemas complejos (materia granular, sistemas biológicos, polímeros etc.)
- Nuevas aplicaciones científicas y tecnológicas de la Física Moderna.

2. Aunque en forma incipiente y no de manera sistémica, se realizan algunas reestructuraciones de contenidos que propician la introducción de contenidos de la Física Moderna en temas de Física Clásica.

3. Se aprecia un incremento en la introducción de contenidos aplicados con un alto nivel de actualización.

2. Tendencias a partir de los programas de la disciplina.

Se consultaron, mediante acceso por Internet, los programas de universidades extranjeras de regiones o sub regiones con características similares en cuanto a contexto socio político y cultural que resulten representativas en la enseñanza de la ingeniería a nivel regional o global (8 en el área de Latinoamérica, 8 de Estados Unidos y 14 de Europa).

Para compensar el hecho de que algunos de los programas consultados no tienen declarados los objetivos, ni el sistema de habilidades y en

ocasiones son muy sintéticos los sistemas de conocimientos, se tuvieron en cuenta en esos casos, todos los elementos que pudieran brindar indirectamente información tales como: ubicación de la disciplina en el plan de estudio, precedencias, número de créditos, libros de texto utilizados e incluso programas de otras disciplinas cuyos objetos de estudio por cercanía al de la Física pudieran provocar solapamiento o incluso eliminación de algunos contenidos de esta última.

Se concluyó la existencia de las siguientes **tendencias** en la actualización de la Disciplina Física para Carreras de Ingeniería en el extranjero (10):

1. La tendencia a realizar el tratamiento de contenidos relacionados con la Física Moderna en asignaturas opcionales, característica de las décadas del 60 al 80, se ha sustituido por la inclusión de la misma en forma obligatoria en el Curriculum de las Ingenierías. Esto por supuesto se realiza de forma no uniforme destacándose dos vías fundamentales:

- Incorporación de la Física Moderna como asignatura o tema de una asignatura dentro de la disciplina Física. Esta vía se manifiesta fundamentalmente en Universidades Latinoamericanas (incluyendo a Cuba) y en cierta medida en las Estadounidenses.
- Incorporación de contenidos de Física Moderna en otras disciplinas del Curriculum de las Carreras. Esto es característico en las Universidades Europeas y también en las Estadounidenses y tiene su mayor representatividad en aquellas Carreras que como la Ingeniería Química, la Ingeniería en Materiales, etc, requieren en la actualidad de un mayor conocimiento en el nivel micro estructural de la materia, tanto por el objeto de su profesión como por el equipamiento utilizado.

2. Los contenidos tratados en la Física Moderna se limitan, fundamentalmente, a los relacionados con los avances de la Ciencia Física en la primeras décadas de este siglo que ya concluye. No obstante, en forma aún muy incipiente y limitada principalmente a las Universidades de mayor prestigio y tradición en la enseñanza de la Ingeniería, se manifiesta la tendencia a incluir contenidos de una mayor actualidad prevaleciendo en la selección de los mismos una lógica de profesionalización (por ejemplo se incluye el Láser pero no el Modelo Estándar de la Materia).

3. En forma espacialmente limitada a las Universidades de avanzada, aunque ya comienza a manifestarse también en otras, se tiende a una ruptura con los esquemas tradicionales de organización del contenido. Esta ruptura está relacionada con la utilización más efectiva y eficiente

de la lógica del objeto y tiene su principal ejemplo en los programas del MIT.

En el caso de los programas cubanos la información fue obtenida a partir de la consulta de tesis doctorales (11, 12) y entrevistas a los autores de los programas.

Del análisis efectuado se concluye la existencia de las siguientes **tendencias** en la actualización de los contenidos de los programas de Física General para Ciencias Técnicas en Cuba :

1. A pesar de la relativamente temprana introducción de contenidos de la Física Moderna en los programas de nuestro país, éstos, como tendencia, se han limitado a los relacionados con descubrimientos realizados en las primeras décadas del siglo actual. Lo que unido al enfoque predominantemente historicista que prevalece en la enseñanza de ese tema condiciona una importante fuente de problemas relacionados con la actualización de la disciplina.

2. A partir de los planes C existe una tendencia a la reestructuración de contenidos con un mayor predominio de los métodos deductivo y lógico sobre los inductivo e histórico. Este aspecto contribuye sin dudas a un mejor desarrollo del pensamiento teórico en los estudiantes, permitiendo además una importante economía de tiempo en las disciplinas.

3. En todos los programas analizados se han introducido, fundamentalmente a partir de los planes C, nuevos contenidos. El análisis efectuado permite concluir que muy pocos son verdaderamente actuales y en su gran mayoría responden al objetivo de incrementar la profesionalización de las disciplinas. Esta tendencia pone de manifiesto una hiperbolización del proceso de profesionalización en detrimento de la actualización de la fundamentalización en las disciplinas.

4. A pesar de haber sido superado, en buena medida, el enciclopedismo de contenidos que marcó la década del 60, a partir de los planes C y más acentuadamente en el proceso subsiguiente de perfeccionamiento, éste se presenta con nuevas manifestaciones. Hay una tendencia a lo que se llamaría un "enciclopedismo profesionalizado" o sea un tratamiento pormenorizado y excesivo de contenidos de aplicación vinculados a la profesión.

5. A partir del perfeccionamiento que ha dado lugar a los planes C se manifiesta, en prácticamente todos los programas, el planteamiento de objetivos donde se refleja un nivel de asimilación

productivo para un conjunto importante de contenidos.

Conclusiones

La determinación de las tendencias anteriores permite concluir las siguientes insuficiencias en el proceso de actualización de los contenidos de enseñanza de la disciplina Física General para Ingeniería:

1. No posee un carácter sistémico.

No existe un criterio científicamente argumentado de cuales contenidos incorporar y de cómo realizar esa incorporación de manera que se revelen claramente los componentes del sistema (Proceso Docente Educativo de la Disciplina Física General) y la relación entre ellos que como se sabe determinan su dinámica, su movimiento (13).

2. No rompe con la estructura ortodoxa que divide a la Física (para su enseñanza) en Física Clásica y Física Moderna.

El proceso histórico que condujo al surgimiento de la Física Moderna dio la falsa impresión de que existen dos Físicas con dos objetos de estudio diferentes cuando en realidad existe uno sólo: la materia y las formas físicas de su movimiento. Como plantea M. Alonso: "La Física debe ser tratada en el curso de Física General como un cuerpo de conocimientos, donde lo clásico y lo moderno sea mezclado en un todo coherente, en una nueva Física"

3. No tiene en cuenta una relación fundamentalización profesionalización adecuada.

En la actualidad, en el mundo, existen para esta disciplina dos enfoques en relación con su contenido de enseñanza: fundamentalización y profesionalización.

El primero relacionado con los fundamentos de la ciencia Física y el segundo que implica su adaptación a los problemas profesionales del futuro ingeniero.

Aunque se ha planteado que la adecuada combinación de estos enfoques constituye una estrategia fundamental del actual proceso de perfeccionamiento en nuestro país (14), y que desde el punto de vista de su propia concepción la calidad del egresado es superior, ya que todo el sistema (incluyendo la disciplina Física) se dirige al logro de los objetivos fundamentales de la especialidad (15), los trabajos realizados en esta dirección resultan aún insuficientes.

REFERENCIAS

1. Alonso, M., (1992): "Actualizando el Curso de Física General. Revista Española de Física 6 (3), pp 35.
2. García, M. A., y otros., (1994): "Física Aplicada, la mejor opción en la enseñanza de la Física en ingeniería." Memorias I taller internacional "Física, talento y desarrollo". La Habana.
3. García, M. A., Z. A., Ferrat (1995): "La estrategia del perfeccionamiento de la Física para estudiantes de Ingeniería." Revista Cubana de Educación Superior, No. 3, 1995. pp 48-50
4. Addine, F., (1998): "El proceso de enseñanza y sus componentes fundamentales. Diversidad de sus relaciones desde sus fundamentos teóricos." Folleto de Didáctica de Maestría en Educación. Facultad Ciencias de la Educación. ISPEJV. C. Habana pp 81
5. Addison, W., (1996): "Trends in Physics: From Quantum Mechanics to Chaos." Reading Massachusetts, Ed. Regis, pp190-198.
6. Alonso, M., E.J. Fin.,(1995): "Física". Addison Wesley Iberoamericana S.A. Wilmington, Delaware, EUA.
7. Halliday, D., R, Resnick., K, Krane. (1996): "Física". Compañía Editorial Continental, S. A. de C.V. México.
8. Serway, R. A. (1994): "Physics for scientist & engineers with Modern Physics". 3ª. edición, Mc. Graw Hill.
9. Gettys, W. E., F. J. Keller., M. J. Skove., (1994): "Physics Classical and Modern" Clemson University. Mc. Graw Hill,
10. Patiño, C. A. (1999): " Contenidos de enseñanza de la Física General en Ciencias Técnicas: concepción y metodología para su actualización". Tesis en opción al grado científico de Dr. en C. Pedagógicas. pp 20-47.
11. García, M. A. (1997): "Física General Aplicada: Novedosa concepción para la enseñanza de la Física en Ciencias Técnicas." Tesis en opción al grado de Doctor en C. Pedagógicas.
12. Horroutines, S. P. (1988): "El perfeccionamiento del sistema de conocimientos en la disciplina Física para estudiantes de Ingeniería." Tesis en opción al grado de Doctor en C. Pedagógicas.
13. Alvarez de Zayas, C. (1998): "La Escuela en la Vida." Editorial Academia. Habana. pp 59-61
14. Alvarez de Zayas, C. (1992): Fundamentos teóricos del proceso docente educativo en la educación superior cubana. Editorial Instituto cultural y de amistad boliviano cubano. La Paz, Bolivia. pp105
15. Patiño, A., y otros. (1998): "La Física General Aplicada en el Curriculum de la Ingeniería Química." Memorias del III Taller Internacional sobre la enseñanza de la Física en Ingeniería. ISPJAE. Ciudad Habana.

EXPERIENCIAS ACERCA DE UNA MAESTRÍA EN CIENCIAS EN LA ESPECIALIDAD DE ÓPTICA

Angel G. Augier, Adriana Mavilio, Agueda García. Instituto Superior Politécnico "José Antonio Echeverría" (ISPJAE) Laboratorio de Óptica Coherente, Departamento de Física.

RESUMEN

Aproximadamente cuarenta graduados universitarios han completado sus estudios especializados en Óptica. Estos estudios especializados han posibilitado un desarrollo exitoso en sus tareas profesionales en instituciones nacionales. En la concepción del plan de Maestría en Ciencias en la especialidad de Óptica se considera la continua superación profesional, teniendo en cuenta la experiencia acumulada, los requisitos de entrenamiento de los recursos humanos, así como las tendencias mundiales contemporáneas de desarrollo.

ABSTRACT

About forty university graduates have completed their specialized studies in Optics. These specialized studies enable their successful development in their professional tasks in national Cuban institutions. In the conception of the Optics Master of Science degree plan, professional improvement is considered regarding the accumulated experience, the training requirements of human resources, as well as the contemporary world development trends.

1. INTRODUCCION

En el mundo actual, la óptica, las técnicas láser y sus aplicaciones constituyen un importante campo del saber. Las aplicaciones tecnológicas del láser en el tratamiento de materiales, el desarrollo y utilización de los sensores ópticos, el uso de fuentes de luz y fibras ópticas en las telecomunicaciones y en la electrónica en general y muchas otras aplicaciones, hacen de la óptica y las técnicas láser un campo de enormes posibilidades actuales y futuras.

En las ciencias de la vida, la Biología, la Medicina, Biotecnología y Bioingeniería, son numerosas las posibilidades de la luz y en especial del láser, tanto por sus usos específicos como por sus posibilidades de desencadenar procesos positivos en los medios biológicos.

La existencia en Cuba de algunos centros de reconocida experiencia y prestigio en este campo, entre los que se cuentan el propio Departamento de Física del Instituto Superior Politécnico "José Antonio Echeverría" (ISPJAE), el Instituto de Materiales y Reactivos (IMRE) y la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, el Centro Nacional de Investigaciones Científicas (CENIC), el Centro de Desarrollo de Equipos e Instrumentos Científicos (CEDEIC) y el Centro de Estudios Aplicados al Desarrollo Nuclear (CEADEN); así como el incremento de las relaciones de colaboración científica y docente sostenidas con profesores e investigadores latinoamericanos o de otras partes del mundo, hace necesario consolidar la formación académica de postgrado a los graduados universitarios que laboran en esta rama.

Tomando como base los antecedentes del Curso de Especialista en Óptica, Láser y Holografía, del ISPJAE iniciado en 1979 como estudio de postgrado, así como las necesidades que con relación a la formación académica de postgrado demandan los centros del Polo Industrial que se desarrollan en este campo, el ISPJAE, del Ministerio de Educación Superior, en estrecha colaboración con el CEDEIC del Ministerio de la Ciencia, la Tecnología y el Medio Ambiente, ha conformado la *MAESTRIA EN OPTICA*¹, que recoge las ideas más positivas de nuestros intentos anteriores. Asimismo, la concepción y nivel de esta Maestría se encuentra a la altura de otras existentes en el ámbito nacional² e internacional^{3,4}, en especial en Latinoamérica⁵.

2. INGRESO Y PERFIL DEL EGRESADO

La Maestría en Óptica va dirigida a Licenciados en Física o en cualesquiera otra especialidad de Ciencias, Ingenieros de cualquier especialidad de Ciencias Técnicas o graduados del Pedagógico Superior en la Especialidad de Física. El egresado adquiere una formación especializada en Óptica en general, a través de las asignaturas obligatorias a cursar, y en algunas de sus ramas más específicas mediante las asignaturas optativas. La línea seleccionada será profundizada por medio de un trabajo de investigación que, dirigido por un tutor, constituya la culminación de estos estudios en la forma de un trabajo de tesis.

3. SISTEMA DE OBJETIVOS Y ESTRUCTURA DEL PLAN

Los objetivos tienen en cuenta formar posgraduados de alto nivel capaces de:

1. Aplicar conocimientos avanzados de la Óptica en algunas de sus ramas especializadas.

2. Aplicar el método científico en la formulación y solución de problemas científico-técnicos en estas ramas, tanto desde el punto de vista teórico como experimental.

3. Explotar adecuadamente las técnicas y equipamiento basados en los fenómenos de la Óptica y el láser que existan, se desarrollen ó adquieran nuestras industrias, centros de investigación y universidades.

4. Aplicar un enfoque interdisciplinario en las diversas áreas donde la Óptica y las técnicas láser pueden ser empleadas.

5. Dominar algunas técnicas fundamentales de cómputo digital y sus aplicaciones en Óptica.

La Maestría en Óptica se conforma mediante los siguientes temas centrales:

Formación y Tratamiento de Imágenes y Señales; Metrología; Fotobiología y Fotomedicina; Fotometría, Fuentes de Luz y Sensores Ópticos; Desarrollo de Sistemas e Instrumentos Ópticos; Aplicaciones Ingenieriles de la Óptica y el Láser; Óptica Avanzada: Teórica y Experimental.

Estos temas centrales están en correspondencia con las principales líneas de investigación y desarrollo de los centros cubanos que trabajan en el área de la Óptica, las técnicas láser y sus aplicaciones.

4. SISTEMA DE EVALUACION

En correspondencia con la naturaleza, objetivos y metodología empleada en las diversas actividades docentes, las evaluaciones podrán realizarse mediante exámenes, tareas evaluadas, seminarios, evaluación de las prácticas de laboratorio y serán precisadas a propuesta del profesor, por el Comité Académico en el momento oportuno.

Para aprobar el plan de la maestría y obtener el título de Maestro en Óptica, se requiere obtener un mínimo total de 70 créditos distribuidos de la siguiente manera:

1) Un mínimo de 40 créditos en cursos, incluyendo asignaturas obligatorias y opcionales.

2) Un máximo de 3 créditos por impartición de seminarios de investigación a razón de 1 crédito por seminario como máximo.

3) Presentación de trabajos en eventos nacionales e internacionales organizados en el país, a razón de 1 crédito por trabajo, hasta un máximo de 3 créditos.

4) Publicaciones de artículos en revistas científicas o memorias de eventos internacionales. El tutor otorgará hasta 3 créditos por publicación, según considere la contribución del aspirante en el

trabajo, con un máximo total de 6 créditos por este concepto.

5) Por la tesis; proyecto, realización y defensa, el tutor otorgará un total de hasta 30 créditos.

La distribución de créditos para las asignaturas obligatorias es:

Óptica avanzada (3); Óptica de Fourier (3); Óptica no lineal (2); Teoría de los Sistemas Ópticos (2); Óptica Cuántica (3); Medición de parámetros del Láser (2); Electrónica para la Óptica (2); Optoelectrónica (2); Metodología de la Investigación Científica (3); Sistemas de programas de ayuda para cálculo científico (3).

Las asignaturas optativas son: Holografía; Procesamiento de imágenes; Técnicas ópticas de medición; Fotobiología y fotomedicina; Diseño de sistemas e instrumentos ópticos; Óptica estadística; Aplicaciones tecnológicas del láser; Enlaces ópticos; Aplicaciones médico-biológicas del láser; Propiedades ópticas de los Sólidos; Análisis de señales; Procesos estocásticos.

Por cada asignatura optativa se otorgan tres créditos. El criterio de otorgamiento de los créditos obedece al estimado de 15 horas lectivas o fracción por crédito. Para obtener el mínimo de 40 créditos exigido en cursos, el aspirante debe seleccionar un mínimo de 5 materias optativas.

Con vistas a actualizar y perfeccionar la maestría se ha tomado en cuenta, no solamente los aspectos técnicos de los contenidos, sino también los aspectos metodológicos relacionados con los métodos modernos de enseñanza.

5. ALGUNOS RESULTADOS

Algunos resultados de la aplicación de los programas que han tenido lugar en nuestro Instituto, desde 1979 hasta la fecha se muestran en las tablas siguientes.

El programa de Maestría en Ciencias en esta especialidad empezó en 1995 (Primera Edición), y continúa después en 1998 (Segunda Edición).

La información incluye la composición de participantes según sus especialidades universitarias, así como los temas de sus correspondientes tesis.

6. CONCLUSIONES

El desarrollo y aplicación de esta Maestría constituye un salto cualitativo respecto a los sistemas de estudios de postgrado en óptica que existieron con anterioridad en nuestro país.

Cerca de cuarenta profesionales universitarios han recibido hasta la fecha una formación académica básica.

1.1. Programa de Especialista en Óptica, Láser y Holografía (1979 y 1984)

Tabla 1. Composición del Programa de Especialistas.

No. de participantes	Licenciados En Física	Licenciados en Educación	Ingenieros
12	8	2	2

Tabla 2. Tópicos de Tesis del Programa de Especialistas.

Formación y procesamiento de imágenes y señales	8
Desarrollo de sistemas e instrumentos ópticos	2
Aplicaciones de la Óptica y el Láser en ingeniería	2

1.2. Programa de la Maestría en Óptica (Primera Edición. Enero-1995)

Tabla 3. Composición del programa de Maestría en Óptica. (Primera Edición)

No. de participantes	Licenciados En Física	Licenciados en Educación	Ingenieros
12	8	1	3

Tabla 4. Tópicos de Tesis del programa de Maestría en Óptica. (Primera Edición)

Formación y procesamiento de imágenes y señales	3
Metrología	2
Fuentes de luz y sensores ópticos	1
Desarrollo de sistemas e instrumentos ópticos	3
Aplicaciones de la Óptica y el Láser en ingeniería	3

1.3. Programa de la Maestría en Óptica (Segunda Edición. Enero -1998)

Tabla 5. Composición del programa de Maestría en Óptica. (Segunda Edición)

No. de participantes	Licenciados En Física	Licenciados en Educación	Ingenieros
13	7	5	1

Tabla 6. Tópicos de Tesis del programa de Maestría en Óptica. (Segunda Edición)

Formación y procesamiento de imágenes y señales	4
Metrología	1
Fotobiología y Fotomedicina	1
Fuentes de luz y sensores ópticos	1
Desarrollo de sistemas e instrumentos ópticos	4
Aplicaciones de la Óptica y el Láser en ingeniería	2

Cerca de cuarenta profesionales universitarios han recibido hasta la fecha una formación académica básica en este campo que les ha permitido desarrollar exitosamente su labor profesional en diferentes centros e instituciones nacionales. En la concepción de la Maestría está contemplado su continuo perfeccionamiento en función de las experiencias acumuladas en cada edición anterior, los requerimientos de formación de recursos humanos en el ámbito nacional, así como las tendencias de desarrollo del mundo contemporáneo en las ramas de la Ciencia y la Tecnología.

Esta Maestría en Óptica es de gran importancia en el

contexto educativo nacional y forma parte de un sistema de recursos humanos muy calificado, antecedido por el programa de pregrado académico, y continuado por los programas de doctorado.

Más de un 70 por ciento del Claustro está formado por Doctores y en el mismo intervienen profesores e investigadores procedentes del ISPJAE, así como de algunos centros de investigación nacionales.

Todo lo antes mencionado ha contribuido a iniciar una fuerte interrelación entre la docencia y la investigación a lo que se incorpora, aún en forma incipiente pero en aumento, la producción.

REFERENCIAS

1. Programa de Maestría en Óptica. Departamento de Física, ISPJAE, La Habana, Cuba, 1996.
2. Programa de Maestría en Ciencias Físicas. Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba, 1996.
3. Optical Electronics. MSc. University of Strathclyde, Canada, 1995.
4. Physical Methods of Materials Characterization. MSc. University of Warrick, U.K, 1995.
5. Programa de Maestría y Doctorado en Óptica. Centro de Investigación Científica y Educación Superior de Ensenada (CISESE). Ensenada B. C. México, 1995.

ESTUDIO DE TASAS DE SEDIMENTACION Y DATACION DE SEDIMENTOS EN LA BAHIA DE SANTANDER (ESPAÑA)

J. Soto^{*1}, J. Gómez*, O. Díaz**, A. Gelen**

* Universidad de Cantabria. Santander, España.

** Instituto Superior de Ciencias y Tecnología Nucleares. La Habana, Cuba.

RESUMEN

En el presente trabajo se analizaron dos cortes del sedimento de la Bahía de Santander en España. El corte se hizo por centímetro y se mide utilizando el trazador radiactivo para determinar el Pb-210 y la concentración asociada al Ra-226. Se calculó la edad de las capas de sedimento y sus componentes metales. El incremento de la sedimentación en los últimos cien años es de 0.08 cm a 0.30 cm.

ABSTRACT

Two sediment cores from the Santander Bay (Spain) has been studied for dating purposes. The cores are cut off every centimeter and measured by a germanium low background gamma spectrometry system for determining the Pb-210 and the associate Ra-226 concentrations. Age profiles and sedimentation rates of the cores were calculated from the constant rate of supply model. Age profiles of the sediment constructed from the radionuclide measurements were used to determine historical trends of organic compounds and contaminant metals. The sedimentation rates calculated are increasing along the century with values from 0.08 cm/y to 0.30 cm/y. The evolution of sedimentation rates was in good agreement with the filling periods happened the last 100 years.

INTRODUCCION

La bahía de Santander (España) es un ecosistema complejo que posee como uno de sus principales problemas el vertido de sustancias de origen industrial y urbano. La deposición de vertidos puede producir una contaminación permanente de los fondos de la bahía que induzca alteraciones en las cadenas tróficas afectando a plantas y animales. En este sentido, la datación de los sedimentos depositados posee un gran interés para poder correlacionar la edad de cada capa con su contaminación química e identificar la evolución en el tiempo de cada tipo de vertido.

Calculables a partir de las edades de las capas, las tasas de sedimentación reflejan la acumulación de sustancias, y entre ellas las de origen industrial o urbano, y de qué manera se está modificando el relieve del fondo de la bahía. En el caso de que existan procesos antrópicos, éstos se añaden a los que ocurren por causas naturales acelerando las modificaciones del fondo y pudiendo hacer que se produzcan cambios en los flujos de agua, que influyen en procesos como el de erosión de playas.

El estudio de tasas de sedimentación y datación de sedimentos se realiza desde hace años usando isótopos radiactivos naturales y artificiales presentes

en el ambiente. Para lapsos de tiempo correspondientes a las últimas decenas de años, los de mayor influencia del hombre, los métodos empleados son los basados en el Cs-137 y en el Pb-210. En este trabajo hemos estudiado las tasas de sedimentación existentes en un conjunto de puntos de la bahía de Santander y calculado la edad de cada una de sus capas utilizando el trazador radiactivo Pb-210.

METODO DE DATACION POR Pb-210

El Pb-210 es un isótopo radiactivo natural, con periodo de semidesintegración de 22.3 años, perteneciente a la serie del U-238. Dentro de ésta se encuentra el gas noble radón (Rn-222) que, debido a su carácter gaseoso, puede escapar de las rocas y suelos de la corteza terrestre donde se forma por desintegración del Ra-226. Una vez en el aire, el radón decae con su periodo de semidesintegración de 3.8 días dando lugar a sus descendientes. Entre ellos se encuentra el Pb-210 que se deposita continuamente sobre la superficie del suelo.

El Pb-210 precipitado se puede encontrar en muestras de sedimentos a la vez que otra fracción del mismo isótopo producido en ellos por la desintegración del Ra-226 presente en el material. Este último estará en equilibrio secular con el Ra-226

¹ sotoj@galeno.medi.unican.es

y decaerá con la semivida de éste. A esta fracción se la conoce como Pb-210 en equilibrio mientras que a la fracción precipitacional se la conoce como Pb-210 en exceso. A partir de la concentración de Pb-210 en exceso en un perfil de sedimento se puede conocer la tasa de sedimentación y datar las diferentes capas del mismo, [1, 2].

La concentración de Pb-210 en equilibrio se puede conocer de la concentración total de Pb-210. Al decaer el Pb-210 en exceso con su propio período, la fracción deposicional habrá decaído completamente a una determinada profundidad, estando todo el Pb-210 en equilibrio con el Ra-226. A partir de esta zona la concentración de Pb-210 será prácticamente constante. Sin embargo, es posible que la concentración de Ra-226 varíe de unas capas a otras del sedimento, por lo que el valor constante de Pb-210 de las últimas capas no corresponderá a la concentración de Pb-210 en equilibrio y, por ello, es conveniente realizar una determinación independiente del contenido en Ra-226 en algunas capas del sedimento, [3,4].

Los modelos utilizados para el cálculo de tasas de sedimentación y de edades de las distintas capas del sedimento son, principalmente, el C.I.C. y el C.R.S.

El modelo C.I.C. (Constant Initial Concentration), [5], parte de la hipótesis de la constancia de la concentración inicial en cada capa de sedimento. Si llamamos $C(0)$ a esta concentración podemos calcular, a partir del valor actual medido C_i en cada capa i del sedimento, la edad de la misma:

$$C_i = C(0) \exp \{-\lambda \cdot t_i\}$$

donde λ es la constante de desintegración del Pb-210, $\lambda = \ln 2 / 22.3 \text{ años}^{-1}$, y despejando

$$t_i = (1/\lambda) \ln [C(0) / C_i]$$

A la vista de las ecuaciones anteriores es inmediato concluir que la aplicación del modelo C.I.C. a un sedimento exige que el perfil de la concentración de Pb-210 en exceso sea monótonamente decreciente, [6,7].

El modelo C.R.S. (Constant Rate of Supply) parte de la suposición de que el flujo de Pb-210 en exceso a los sedimentos es constante durante la formación de éstos, sin poner restricciones a la velocidad de sedimentación, [8,9]. Debido a ello, la forma del perfil de concentraciones de Pb-210 en exceso no tiene por que ser monótonamente decreciente. Al mantenerse constante el aporte de esta fracción al sedimento una disminución en la velocidad de sedimentación se verá reflejada en un aumento de la concentración de Pb-210 en exceso.

El valor de la concentración por unidad de superficie de Pb-210 en exceso desde la superficie hasta el espesor másico m (que corresponderá a

una profundidad z), que llamaremos $A(m)$, será la integral del flujo de éste sobre el tiempo transcurrido desde la formación de la capa en cuestión hasta el momento del muestreo. Expresado matemáticamente:

$$A(m) = \int_0^m C(m) dm = \int_0^t F \cdot e^{-\lambda t} dt$$

El valor de $A(m)$ se calcula de las concentraciones de Pb-210 en exceso del sedimento como:

$$A(m_i) = \sum_0^n C_i d_i e_i$$

donde C_i , d_i y e_i son la concentración por unidad de masa, la densidad y el espesor de la capa i respectivamente, y n es el número de capas situadas por encima de la que queremos datar.

Considerando la totalidad de del sedimento,

$$A(\infty) = \int_0^\infty C(m) dm = \int_0^\infty F \cdot e^{-\lambda t} dt = F/\lambda$$

A partir de estas ecuaciones se obtiene la edad de una capa determinada:

$$t = (1/\lambda) \ln [A(\infty) / A(\infty) - A(m)]$$

Para calcular los diferentes $A(m)$ es necesario conocer la concentración de Pb-210 en todas las capas del sedimento, así como sus densidades.

MUESTREO Y MEDIDA DE SEDIMENTOS

Para el estudio de sedimentos se han recogido muestras en dos puntos, mencionados como puntos 4 y 9, situados en la ría de Astillero y en la del Cubas, en lugares que afloran durante mareas bajas importantes. La recogida de muestras se realiza en tubos de plástico cilíndricos de 60 cm de longitud y 12 cm de diámetro. Las muestras se guardan en frigorífico hasta su preparación.

La preparación de las muestras se realiza dividiendo cada una de ellas en dos partes según un plano longitudinal. Con las muestras así divididas se fotografían para conocer la posible existencia de estratificación. Con el mismo propósito se han realizado radiografías de las muestras una vez ensayado diferentes condiciones de miliamperaje y voltaje del tubo de rayos X. A continuación cada muestra se marca cada centímetro y se corta según capas de este espesor. De las muestras originales se obtuvieron de esta manera 40 muestras del punto 4 y 49 muestras del punto 9, correspondientes a las distintas profundidades desde la superficie. Las muestras de punto se numeran y se secan en estufa durante 24 horas a 110°C. Después se muelen, se tamizan y se envasan en recipientes de plástico de 100 cm³. Los recipientes son botes cilíndricos de 6 cm de diámetro y 3 cm de altura que se cierran herméticamente una vez llenados. Se normaliza la

preparación de muestras poniendo en cada recipiente una cantidad de 50 g.

Las muestras preparadas se almacenan durante 30 días para que se establezca el equilibrio radiactivo entre el Ra-226, el Rn-222 y los descendientes de vida media corta de este último. Las muestras de sedimento se miden por espectrometría gamma, [10,11], utilizando un detector de semiconductor de Ge HP marca Canberra de configuración vertical. El detector está unido a un recipiente con nitrógeno líquido mediante un dedo frío y situado en el interior de un castillete de hierro de baja radiactividad de 10 cm de espesor para disminuir la radiación externa. El detector se encuentra unido a una cadena electrónica Canberra compuesta por una fuente de alimentación, un preamplificador y un amplificador. Las señales procedentes de ésta son recogidas por un analizador multicanal Accuspec con tarjeta para ordenador. La cadena de espectrometría se encuentra en el laboratorio de Física Médica que se mantiene a una temperatura constante de 17°C.

La medida de cada muestra preparada se realiza durante un intervalo de tiempo de 24 horas. A partir del recuento se obtiene el espectro de la muestra donde aparecen los fotopicos de los elementos radiactivos emisores gamma presentes. Para cada una de las muestras se consideran las siguientes energías de los fotopicos correspondientes a los elementos que se mencionan: 0.047 Mev (Pb-210); 0.063 Mev (Th-234); 0.186 Mev (Ra-226); 0.352 Mev (Pb-214); 0.610 Mev (Bi-214); 0.662 Mev (Cs-137); 0.911 Mev (Ac-228); 1.460 Mev (K-40); 2.614 Mev (Ti-208).

Para determinar la eficiencia de detección de cada una de estas radiaciones se utilizan muestras de actividad conocida, en matriz terrosa, preparadas con la misma geometría que las muestras a medir. Las muestras de actividad conocida provienen de los sucesivos ejercicios de intercomparación de medidas realizados por el Consejo de Seguridad Nuclear en los que hemos participado conjuntamente con un buen número de laboratorios españoles. Se presta especial atención a la medida de las concentraciones de Cs-137 y Pb-210 en las muestras. Para ello disponemos de varias muestras de sedimentos de actividad conocida medida por el Organismo Internacional de la Energía Atómica y utilizados después en distintos ejercicios de intercomparación.

El cálculo de la concentración de los elementos radiactivos existentes en cada muestra se realiza, como es habitual, a partir del número de cuentas obtenido bajo cada fotopico, teniendo en cuenta background y ruido de fondo, y de su comparación con el proporcionado por las muestras calibradas. En las condiciones utilizadas de masa y geometría de

las muestras, de tiempo de recuento de 24 horas y de ruido de fondo, el límite inferior de detección del método es de 0.5 Bq/Kg para el Cs-137 y de 10 Bq/Kg para el Pb-210. Los errores asociados a las concentraciones obtenidas son debidos principalmente al error estadístico de conteo, menores del 10%.

CALCULO DE TASAS DE SEDIMENTACION

A partir de los resultados obtenidos pueden calcularse las tasas de sedimentación existentes en los puntos muestreados 4 y 9. Este cálculo se basa en las concentraciones encontradas de Pb-210 no soportadas por las correspondientes de Ra-226, Pb-210 en exceso. Para calcular el Pb-210 en exceso basta restar de la concentración de Pb-210 en cada capa la concentración de Ra-226.

Para el cálculo de la tasa de sedimentación en cada punto la primera aproximación consiste en la suposición de que aquella se mantiene constante durante todo el tiempo de formación del sedimento. Esta aproximación es razonable para proporcionar una tasa de sedimentación promedio que, por aplicación del método del Pb-210, lo será durante el período de validez temporal del método.

El valor de la tasa de sedimentación constante se calcula de manera sencilla dentro del modelo C.I.C. Teniendo en cuenta que en este modelo se supone un aporte constante de Pb-210 y una tasa de sedimentación también constante, el Pb-210 en exceso en cada capa del sedimento debe estar relacionado con la profundidad. La relación se expresa en que la concentración en exceso de plomo disminuye exponencialmente con la profundidad, debido a la desintegración radiactiva, al ser cada profundidad una medida del tiempo transcurrido desde la formación de la capa hasta la actualidad o, matemáticamente,

$$C(Pb) = C_0 \exp \{-Iz/a\}$$

donde I es la constante de desintegración del Pb-210, z es la profundidad promedio de cada capa y a es la tasa de sedimentación.

De acuerdo con la expresión anterior para calcular la tasa de sedimentación promedio basta ajustar el conjunto de los valores de Pb-210 en exceso de cada punto muestreado a una función exponencial.

El ajuste de los valores de Pb-210 en exceso obtenido en el punto 4 a una función exponencial da como resultado:

$C(Pb) = 145 \exp \{-0.135 z\}$ $R = 0.9198$
que, por comparación con la ecuación anterior, permite calcular la tasa de sedimentación a :

$$a = \ln 2 / I \cdot 0.135 = 0.23 \text{ cm/año}$$

De la misma manera, el ajuste de los valores de Pb-210 en exceso obtenido en el punto 9 a una función exponencial da como resultado:

$$C(\text{Pb}) = 156 \exp \{-0.104 z\} \quad R = 0.8705$$

que permite calcular una tasa de sedimentación de:

$$a = \ln 2 / 1 \cdot 0.104 = 0.30 \text{ cm/año}$$

Es necesario señalar aquí que estos valores promedio lo son de un intervalo de tiempo correspondiente a las capas de cada muestra utilizadas en el cálculo. Estas han sido de 17, los 17 primeros cm, en el caso del punto 4 y de 24, los 24 primeros cm, en el caso del punto 9. De esta manera los valores de las tasas de sedimentación promedio calculadas serán, según cálculos posteriores, a lo largo de los últimos 74 años en el caso del punto 4 y de los últimos 80 años en el caso del punto 9.

De manera interesante se observa que los coeficientes de ajuste de las funciones exponenciales encontradas son moderadamente bajos. Esto implica que el modelo C.I.C. utilizado, aunque válido para el cálculo de una tasa de sedimentación promedio, no es totalmente adecuado para describir los datos obtenidos, lo que significa que la tasa de sedimentación no se mantiene constante durante el intervalo de tiempo considerado. Una descripción del valor, no constante, de la tasa de sedimentación será obtenido en el cálculo de datación de sedimentos.

APROXIMACION A LA DATAACION DE SEDIMENTOS

Teniendo en cuenta los resultados anteriores, que implican una velocidad de sedimentación no constante, el modelo más adecuado es el C.R.S. Este modelo posee una modificación, C.R.S./MV, [12], que proporciona una visión de hasta qué punto la tasa de sedimentación se mantiene constante y, por ello, hemos intentado su aplicación.

Para la aplicación del modelo C.R.S./MV es necesario conocer en primer lugar los valores de la densidad de cada una de las capas del sedimento. A continuación hay que calcular el inventario de Pb-210 en exceso en cada una de las capas multiplicando la concentración por la densidad. Este inventario representa el total de Pb-210 en cada capa. Posteriormente se calcula el inventario acumulado de Pb-210 sumando desde la superficie el valor de cada capa con los anteriores. El inventario acumulado es el conjunto de $A(m_i)$ que se expresan en la exposición hecha sobre el método C.R.S. El último valor del inventario acumulado es el $A(\infty)$ que se usa en la exposición del método.

La suposición del modelo C.R.S./MV es que el conjunto de términos

$$\ln (A(\infty) / (A(\infty) - A(m_i)))$$

es lineal con la profundidad y puede, por tanto, ajustarse a una recta de la forma $a + b z$ que, de acuerdo con el modelo C.R.S., puede ser igualada al término $1/t$. De la igualdad de estas dos expresiones puede calcularse la edad de cada capa:

$$t = (a + b z) / 1$$

Con respecto al modelo C.R.S., el modelo C.R.S./MV implica de hecho una linealización del inventario acumulado de Pb-210. Se basa en que el conjunto de términos $\ln (A(\infty) / (A(\infty) - A(m_i)))$ se comportará como una recta si a cada $A(m_i)$ se le añade una cantidad constante para dar $A(m_{i+1})$. De esta manera, el conjunto de términos $A(m_i)$ se comportará como una función $A(\infty) \{ 1 - \exp \}$ que, al ser introducida en el término logarítmico, produce que éste sea lineal. Por lo tanto, este modelo es intermedio entre el C.I.C. y el C.R.S. y predecirá tasas de sedimentación constantes.

Para aplicar el modelo C.R.S./MV hemos hecho sucesivos ajustes lineales a los valores de los términos logarítmicos calculados usando números cada vez mayores de puntos a ajustar. En el caso del punto 4 hemos ajustado primeramente 5 términos logarítmicos a una recta con el resultado de que la recta ajustada era:

$$0.0107 + 0.1325 z \quad (R = 0.9988)$$

Esta recta posee un buen coeficiente de correlación y un término independiente próximo a cero por lo que puede considerarse válida. Aplicando el modelo se obtiene la edad de cada una de las primeras 5 capas:

0 - 1 cm	2.6 años
1 - 2 cm	6.6 años
2 - 3 cm	10.6 años
3 - 4 cm	14.6 años
4 - 5 cm	18.6 años

Como puede verse, los valores se corresponden con una tasa de sedimentación de 4 años/cm ó $a = 0.25 \text{ cm/año}$, algo superior al valor promedio obtenido anteriormente.

De la misma manera, hemos ajustado a una recta los valores de los 9 primeros puntos, incluyendo los 5 anteriores, con el resultado de:

$$-0.3122 + 0.2378 z \quad R = 0.9690$$

que no es una ecuación admisible ya que no solamente posee un coeficiente de correlación menor sino que tiene un término independiente elevado, y de valor negativo, que impide calcular la edad para las primeras capas.

En el caso del punto 9 hemos hecho el mismo tipo de análisis, comenzando por ajustar a una recta el conjunto de los primeros 6 datos logarítmicos. La recta ajustada tiene por ecuación:

$$0.0552 + 0.0687 z \quad R = 0.9975$$

que permite calcular la edad de las 6 primeras capas. Estas son:

0 - 1 cm	2.9 años
1 - 2 cm	5.1 años
2 - 3 cm	7.3 años
3 - 4 cm	9.5 años
4 - 5 cm	11.7 años
5 - 6 cm	13.9 años

Este conjunto de valores implican una tasa de sedimentación constante en los primeros 6 cm de 2.2 años/cm ó $a = 0.45$ cm/año, superior a la estimación promedio.

En contraste con el resultado anterior, el ajuste a los primeros 17 puntos ($-0.1768 + 0.1266 z$) o a los primeros 23 puntos ($-0.5785 + 0.1876 z$) no da valores satisfactorios. Posiblemente el método C.R.S./MV utilizado aquí sea válido únicamente para ajustes lineales por tramos en los que deba deducirse la tasa de sedimentación.

CALCULO DE LA EDAD DE LAS CAPAS DE SEDIMENTO

Después de las pruebas anteriores, el cálculo de la edad de cada una de las capas de sedimento de los puntos muestreados ha sido hecho por medio del modelo C.R.S. Igual que anteriormente, para la aplicación de este método es necesario conocer la densidad de cada capa y calcular el inventario de Pb-210 en exceso en cada capa y el inventario acumulado. A partir de estos valores se puede calcular ya la edad de cada capa usando las ecuaciones que describen el modelo y, con las edades de cada capa, las tasas de sedimentación existentes en cada intervalo de tiempo.

En los resultados obtenidos aparece de manera clara la existencia de una modificación de la tasa de sedimentación. A lo largo del tiempo se observa un aumento de la tasa de sedimentación con valores mínimos hace 100 años y valores máximos en la actualidad. Así, en el punto 4 se pasa de un tiempo de unos 13 años para que se deposite un cm ($a =$

0.06 cm/año) a un tiempo de 4.5 años ($a = 0.23$ cm/año). De la misma manera, en el punto 9 se pasa de un tiempo de unos 10 años para que se deposite un cm ($a = 0.10$ cm/año) a un tiempo de 3 años ($a = 0.33$ cm/año).

De manera interesante, puede observarse que los dos puntos muestreados presentan características comunes en cuanto a la modificación de las tasas de sedimentación. En ambos casos se produce un cambio importante en aquellas en torno al año 1950. En el caso del punto 4 se pasa de un valor próximo a 0.06 cm/año a un valor de 0.16 cm/año. En el caso del punto 9 se pasa en las mismas fechas de un valor próximo a 0.10 cm/año a un valor de 0.22 cm/año.

Una modificación de las tasas de sedimentación menos importante, aunque también significativa, se produce en torno al año 1974. En el caso del punto 4, la tasa de sedimentación pasa de ser aproximadamente 0.16 cm/año a ser 0.20 cm/año. En el caso del punto 9, la tasa de sedimentación pasa de ser aproximadamente 0.22 cm/año a ser de 0.33 cm/año.

Teniendo en cuenta los datos anteriores hemos hecho un estudio de las modificaciones que se han realizado en los últimos 100 años en la bahía de Santander relacionadas con la desecación de marismas y rellenos de éstas para construcción. Los resultados obtenidos indican que los períodos de máxima industrialización de la zona sur de la bahía coinciden con los años en los que se han producido variaciones máximas de las tasas de sedimentación. En estos años, las desecaciones y rellenos disminuyeron la superficie de agua de la bahía en una proporción importante. Esta disminución de la superficie de agua debe haber influido en la velocidad de deposición de sedimentos en toda la bahía, coherentemente con los resultados de nuestro estudio, aumentando aquella y tendiendo a convertirla en una marisma.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido realizado dentro del estudio más amplio "Estudio geoquímico e isotópico de la contaminación por metales pesados y compuestos orgánicos en los sedimentos de la bahía de Santander" dirigido por el Prof. J. Viguri de la Universidad de Cantabria que fue financiado en el año 1998 por la Fundación Marcelino Botín.

REFERENCIAS

- [1] El-Daoushy, F. (1988). A summary on the lead-210 cycle in nature and related applications in Scandinavia. *Environment International*, 14: 305-319.
- [2] Dorr, H. (1995). Application of Pb-210 in soils. *Journal of Paleoclimatology*, 13: 157-168.

- [3] Joshi, S.R. (1989): Common analytical errors in the radiodating of recent sediments. *Environ. Geol. Water Sci.* 14(3): 203-207.
- [4] Appleby, P.G. (1998): Dating recent sediments by Pb-210: problems and solutions. STUK, Helsinki, 5-24.
- [5] Faure, G. (1986): *Principles of Isotope Geology*. Ed. Wiley and Sons. New York.
- [6] Shukla, B.S., S.R Joshi, (1989). An evaluation of the CIC model of Pb-210 dating of sediments. *Environ. Geol. Water Sci.* 14(1): 73-76.
- [7] Edgington, D.N., J. Val Klump., J.A, Robbins., Y.S, Kusner., V.D, Pampura., I.V. Sandimirov, (1991): Sedimentation rates, residence times and radionuclide inventories in Lake Baikal from Cs-137 and Pb-210 in sediment cores. *Nature*, 350: 601-604.
- [8] Appleby, P.G., F. Oldfield., (1978): The calculation of lead-210 dates assuming a constant rate of supply of unsupported Pb-210 to the sediment. *Catena*, 5:1-8.
- [9] Martínez, A., L. Romero., J. Palomares., (1990): Datación de sedimentos marinos mediante Pb-210 y Cs-137. XVI Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Oviedo, España.
- [10] Appleby, P.G., P.J. Nolan., F. Oldfield., N. Richardson., S.R. Higgitt, (1988): Pb-210 dating of lake sediments and ombrotrophic peats by gamma assay. *Sci. Total Environ.* 69: 157-177.
- [11] Bolívar, J.P., R. García-Tenorio., M. García-León, (1994): A generalized transmission method for gamma efficiency determination in soil samples. *Nucl. Geophys.* 8(5): 485-492.
- [12] Sánchez-Cabeza, J.A., P. Masque, W.R. Schell., A. Palanques., M. Valiente., C.Palet., R. Pérez., J. Pantaleón., (1993): Record of anthropogenic environmental impact in the continental shelf north of Barcelona city. IAEA-SM-329/18: 175-183.

DETERMINATION OF k_0 -FACTORS FOR k_0 -INAA OF ENVIRONMENTAL SAMPLES

O. Diaz Rizo, I. Alvarez Pellon, E. Herrera Peraza, M.V. Manso Guevara, M.C. Lopez Reyes¹, M. Ixquiac Cabrera.

Institute for Nuclear Sciences and Technology, Habana,

¹Nuclear National Research Institute. México D.F.

The k_0 -factors for 24 nuclides, used in reactor neutron activation analysis, were determined in the Fixed Irradiation System (SIFCA) and in the Pneumatic Irradiation System (SINCA) respectively, of the TRIGA MARK III reactor at the NNRI, Mexico, using a multielemental monitor. The k_0 -factors determined by "bare monitor" and "Cd - subtraction" methods shows a good agreement with the calculated data and with the reported experimental k_0 -factors, using high pure materials. With the aim of carrying out the analytic confirmation of the experimental k_0 -factors, the concentrations of some elements presented in the CRM-SL-1 (for the "large-life" isotopes), and for ²⁸Al, ⁵²V, ²⁷Mg, ⁵⁶Mn, ²⁴Na in the CRM-SOIL-7, were determined in three replicas by k_0 -standardization method. The results shows a good correlation with the reported concentrations in the mentioned environmental CRM

INTRODUCTION

In the k_0 -standardization technique in reactor neutron activation analysis (INAA) the concentration of any element in the sample is determined by a conventional activation analysis formula containing a k_0 -factor -a compound nuclear constant- defined as:

$$k_{0,c}(s) = \frac{M_c \theta_s \sigma_{0,s} \gamma_s}{M_s \theta_c \sigma_{0,c} \gamma_c} \quad (1)$$

where s refers to the standard, c to the comparator and, M - atomic weight, θ - the isotopic abundance of the target nuclide, σ_0 - thermal neutron cross section at a $v_0 = 2200 \text{ m.s}^{-1}$ and γ - absolute γ -intensity.

Usually, to obtain a good accuracy, the k_0 -factor experimental determination is performed using high pure materials [1], but unfortunately their do not always agree with the k_0 's calculated from the tabulated values of the nuclear constants, and sometimes, the measured values disagree from one measurement facility to another [2-5]. It is the reason which the k_0 -factor experimental determination is recommended for the reactor facilities where k_0 -INAA is implemented [6].

In order to apply the k_0 -standardization method in the INAA Laboratory of the NNRI of Mexico, it is necessary to determinate the k_0 -factors for usually studied nuclides. In this case, we try their determination using the Certified Reference Materials (CRM) IAEA: SOIL-7 [7] and SL-1 [8], comparing the obtained results with the reported experimental data, to evaluate the possibility of multiple determination of k_0 -factors for the INAA element of interest.

MATERIAL AND METHODS

Six replicas of IAEA-SOIL-7 standard were irradiated in the Fixed Irradiation System (SIFCA) of the TRIGA MARK III reactor at NNRI, Mexico ($\Phi = 3,4 \cdot 10^{12} \text{ n.s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$, $\alpha = -0.08$ and $f = 64$) [9]. Container with CRM samples (Figure 1) was irradiated during 25 hours to analyze the "large-life" nuclides.

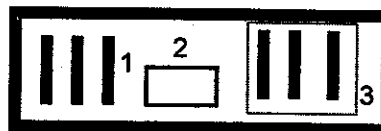


Figure 1.- Irradiation container for k_0 -determination. (1 - bare samples, 2 - paper box, 3 - Cd-covered samples)

Similarly, for the "short-life" nuclides, six containers with two replicas of CRM IAEA: SL-1 standard were irradiated in the Pneumatic Irradiation System (SINCA) ($\Phi = 1,32 \cdot 10^{13} \text{ n.s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$, $\alpha = -0.14$ and $f = 43$) [9]. The samples were irradiated during 1 or 2 minutes. After 7 days of cooling time (for the "large-life" nuclides) and few minutes (for the "short-life" nuclides), the irradiated samples were measured ($t_m = 30 \text{ min.}$) in a well-know efficiency HPGe detector (ORTEC, 78 cm^3 , 1.65 keV for $1332 \text{ keV } \gamma$ -line of ⁶⁰Co, $\epsilon = 3,99 \cdot 10^{-13} \text{ E}^4 - 2,17 \cdot 10^{-9} \text{ E}^3 + 4,52 \cdot 10^{-6} \text{ E}^2 - 5,19 \cdot 10^{-3} \text{ E} + 9,78$ - determined for ¹⁵²Eu γ -lines). All spectra were processed with the program SA [10].

The k_0 -factors were determined according to the "Bare monitor" method [11] as:

$$k_{0,c}(s) = \frac{A_{sp,s}}{A_{sp,c}} \cdot \frac{G_{th,c} \cdot f + G_{ep,c} \cdot Q_{0,c}(\alpha)}{G_{th,s} \cdot f + G_{ep,s} \cdot Q_{0,s}(\alpha)} \cdot \frac{\epsilon_{p,c}}{\epsilon_{p,s}} \quad (2)$$

and to the "Cd-subtraction" method as (for de "large-life" nuclides):

$$k_{0,c}(s) = \frac{A_{sp,s} - \frac{(A_{sp,s})_{Cd}}{F_{Cd,s}}}{A_{sp,c} - \frac{(A_{sp,c})_{Cd}}{F_{Cd,c}}} \cdot \frac{G_{th,c}}{G_{th,s}} \cdot \frac{\varepsilon_{p,c}}{\varepsilon_{p,s}} \quad (3)$$

and, for de "short-life" nuclides, as:

$$k_{0,c}(s) = \frac{\left(\frac{A_{esp}}{\varepsilon_p} \right)_s - \left(\frac{A_{esp}}{\varepsilon_p \cdot F_{Cd}} \right)_{s,Cd}}{\left(\frac{A_{esp}}{\varepsilon_p} \right)_c - \left(\frac{A_{esp}}{\varepsilon_p \cdot F_{Cd}} \right)_{c,Cd}} \cdot \frac{G_{th,c}}{G_{th,s}} \quad (4)$$

where:

$$A_{sp} = \frac{N_p / t_c}{S.D.C.w} \quad \text{and}$$

$$Q_0(\alpha) = \frac{I_0(\alpha)}{\sigma_0}$$

with

- A_{sp} - specific count rate,
- N_p - area in the full-energy peak corrected for pulse losses,
- t_c - counting time (s),
- S - saturation factor,
- D - decay factor,
- C - counting factor,
- w - mass of the element in the CRM (in g.),
- G_{th} - correction factor for the thermal neutron self-shielding,
- G_{ep} - correction factor for the epithermal neutron self-shielding,
- f - thermal-to-epithermal neutron flux ratio,
- α - correction factor for the non-ideality of the epithermal neutron flux distribution ($1/E^{1+\alpha}$),
- $I_0(\alpha)$ - resonance integral for ($1/E^{1+\alpha}$) epithermal neutron spectrum,
- ε_p - full-energy peak detection efficiency,
- F_{Cd} - correction factor for the Cd-transmission of epithermal neutrons.

Scandium and Sodium presents in CRM were chosen as the monitors for the "large" and "short" life nuclides respectively, attended to its good activation and to its resonance integral to thermal cross section is approximately equal to the expected of a $1/v$ cross section.

Calculated $k_{0,Sc/Na}$ - factors were also determined by expression (1), using nuclear data taken from the Ref. [1,5,12]. Its was performed (as both mentioned experimental methods) with program KCERO in an IBM/PC.

RESULTS AND DISCUSSION

Experimental and calculated $k_{0,Au}$ were estimated from $k_{0,Sc/Na}$ as:

$$k_{0,Au}(\text{Element}) = k_{0,Au}(\text{Sc/Na}) \times k_{0,Sc/Na}(\text{Element})$$

using the experimental values $k_{0,Au}(\text{Sc/Na})$ and calculated $k_{0,Au}(\text{Sc/Na})$ reported by De Corte in Ref. [1].

Calculated factors and the comparison of estimated $k_{0,Au}$ -factors using CRM and high pure standards [1,5] for the "large-life" nuclides are presented in Table 1. In the same way, the k_0 factors for the "short-life" nuclides are shown in Table 2.

Systematical errors for both methods were in range 13-20% for "bare monitor" and 27-38% for "Cd-subtraction method (see Table 1). Here, the errors of the elemental concentration values reported for SOIL-7 are the major contributor. In the Cd-covered method, the poor statistic in the Cd-covered samples of the γ -activity for some elements is considerable too.

A correlation between the experimental results with the expected calculated values for $k_{0,Sc}$ (Table 3) shows the relative advantage for the bare monitor method respect to Cd-subtraction. Only for 604.7 keV line of ^{134}Cs , the Student Test [13] is not available (see Figure 2). It is possible, because usually for this line, a very strong interference of ^{124}Sb is present.

On the other hand, is relevant the good coincidence for all nuclides (except the mentioned ^{134}Cs line) between the obtained in this work $k_{0,Au}$ -factors and the experimental factors reported in [1,5].

In Table 2, the systematic errors for the experimental methods, were between the 5-19% for the method of "Cd-Subtraction" and between 13-29% for the of "bare monitors" contributing considerably to these errors (as in the "large-life" nuclides case) the elemental concentrations values reported for the SOIL-7 and SL-1.

The results obtained after using the method of the "Cd- Subtraction" are better, since carrying out the irradiations with Cd-covered, the errors product of the imprecision of the nuclear data (I_0 , σ_0 , Q_0) and of the characteristic parameters of the flux of the reactor (α , f) are eliminated.

Had to be discarded for the analysis, the lines of 843,8 keV of the ^{27}Mg and 1811,2 keV of the ^{56}Mn ,

for being interfered (in the case of the Cd-covered samples) with the "large-life" element ^{101}Mo , as well as the lines of 1644,13 keV and 2170,36 keV of the ^{38}Cl , since this element is present in both MRC, but its concentration is not reported.

The presence of high content of Aluminum in both MRC, limited the determination of more elements, due to the irradiation regimens (even 1 minute), the obtained activities were extremely elevated, for this reason, was necessary to increase the cooling time for the irradiated samples and it attempted again the observation of the characteristic γ lines of nuclides of very short-lives (between 2-5 minutes), for example, many rare earth elements, Potassium, etc.

With the aim of carrying out the analytic confirmation of the experimental k_0 -factors, the concentrations of some elements presented in the CRM-SL-1 (for the "large-life" isotopes), and for ^{28}Al , ^{52}V , ^{27}Mg , ^{56}Mn , ^{24}Na in the CRM-SOIL-7, were determined in three replicas by k_0 -standardization method. The results (see Table 4) shows a good correlation with the reported concentrations in the CRM.

The analysis of precision for $k_{0,\text{sc}}$ -ratios was tested by method introduced by Heydorn in [14], according to the European Community Bureau of Reference (BCR) as

Table 1.- Average k_0 -factor values for "large-life" nuclides by "bare monitor" and "Cd-subtraction" methods, using a Certified Reference Material SOIL-7.

Nuclides	Energy (keV)	k_0 (bare)	k_0 (Cd)	$k_{0,\text{sc}}$ (bare)	$k_{0,\text{sc}}$ (Cd)
^{177}Lu	112.9 208.4	$4,03 \cdot 10^{-2}$ $6,87 \cdot 10^{-3}$	- x)	$4,15 \cdot 10^{-2}$ $6,93 \cdot 10^{-3}$	$4,16 \cdot 10^{-2}$ $7,14 \cdot 10^{-2}$
^{181}Hf	133.0 482.0	$2,21 \cdot 10^{-2}$ $4,58 \cdot 10^{-2}$	$2,04 \cdot 10^{-2}$ $4,23 \cdot 10^{-2}$	$2,24 \cdot 10^{-2}$ $4,75 \cdot 10^{-2}$	$2,37 \cdot 10^{-2}$ $4,56 \cdot 10^{-2}$
^{99}Mo	140.5	$5,88 \cdot 10^{-4}$	$5,87 \cdot 10^{-4}$	$6,09 \cdot 10^{-4}$	$5,27 \cdot 10^{-4}$
^{59}Fe	192.3 1099.2 1291.0	$4,23 \cdot 10^{-5}$ $7,47 \cdot 10^{-5}$ $6,51 \cdot 10^{-5}$	$3,98 \cdot 10^{-5}$ $7,32 \cdot 10^{-5}$ $6,44 \cdot 10^{-5}$	$4,27 \cdot 10^{-5}$ $7,72 \cdot 10^{-5}$ $5,91 \cdot 10^{-5}$	$3,78 \cdot 10^{-5}$ $7,77 \cdot 10^{-5}$ $5,93 \cdot 10^{-5}$
^{169}Yb	197.9	$1,99 \cdot 10^{-2}$	$1,95 \cdot 10^{-2}$	$2,04 \cdot 10^{-2}$	$1,64 \cdot 10^{-2}$
^{131}Ba	215.1 496.3	$3,21 \cdot 10^{-5}$ $7,76 \cdot 10^{-5}$	$3,17 \cdot 10^{-5}$ $7,60 \cdot 10^{-5}$	$3,62 \cdot 10^{-5}$ $7,95 \cdot 10^{-5}$	$2,91 \cdot 10^{-5}$ $6,84 \cdot 10^{-5}$
^{232}Th	311.9	$2,22 \cdot 10^{-2}$	$2,19 \cdot 10^{-2}$	$2,23 \cdot 10^{-2}$	$2,52 \cdot 10^{-2}$
^{160}Tb	298.6	$8,14 \cdot 10^{-2}$	$8,00 \cdot 10^{-2}$	$8,40 \cdot 10^{-2}$	$8,25 \cdot 10^{-2}$
^{51}Cr	320.1	$2,68 \cdot 10^{-3}$	$2,54 \cdot 10^{-3}$	$2,72 \cdot 10^{-3}$	$2,62 \cdot 10^{-3}$
^{175}Yb	396.3	$1,62 \cdot 10^{-2}$	$1,63 \cdot 10^{-2}$	$1,65 \cdot 10^{-2}$	$3,12 \cdot 10^{-2}$
^{82}Br	554.3 776.5	$2,34 \cdot 10^{-2}$ $2,76 \cdot 10^{-2}$	$2,04 \cdot 10^{-2}$ $2,51 \cdot 10^{-2}$	$2,34 \cdot 10^{-2}$ $2,77 \cdot 10^{-2}$	$2,38 \cdot 10^{-2}$ $2,76 \cdot 10^{-2}$
^{124}Sb	602.7 1691.0	$2,89 \cdot 10^{-2}$ $1,56 \cdot 10^{-2}$	$2,70 \cdot 10^{-2}$ $1,48 \cdot 10^{-2}$	$2,96 \cdot 10^{-2}$ $1,51 \cdot 10^{-2}$	$2,96 \cdot 10^{-2}$ $1,41 \cdot 10^{-2}$
^{134}Cs	604.7 795.8	$3,87 \cdot 10^{-1}$ $3,83 \cdot 10^{-1}$	$3,67 \cdot 10^{-1}$ $3,64 \cdot 10^{-1}$	$4,29 \cdot 10^{-1}$ $3,76 \cdot 10^{-1}$	$4,76 \cdot 10^{-1}$ $4,15 \cdot 10^{-1}$
^{140}La	815.8 1596.5	$2,92 \cdot 10^{-1}$ $1,23 \cdot 10^{-1}$	$2,79 \cdot 10^{-2}$ $1,11 \cdot 10^{-1}$	$2,99 \cdot 10^{-2}$ $1,27 \cdot 10^{-1}$	$3,32 \cdot 10^{-2}$ $1,34 \cdot 10^{-1}$
^{86}Rb	1076.1	$7,04 \cdot 10^{-4}$	$7,05 \cdot 10^{-4}$	$7,40 \cdot 10^{-4}$	$7,65 \cdot 10^{-4}$
^{65}Zn	1115.5	$5,65 \cdot 10^{-3}$	$4,94 \cdot 10^{-3}$	$5,54 \cdot 10^{-3}$	$5,72 \cdot 10^{-3}$
^{60}Co	1173.1 1332.0	1,29 1,28	1,23 1,24	1,31 1,31	1,32 1,32
^{47}Ca	1297.0	$9,74 \cdot 10^{-7}$	$9,05 \cdot 10^{-7}$	$1,01 \cdot 10^{-6}$	$9,54 \cdot 10^{-7}$

x) - γ -lines are not observed in the Cd-covered irradiated sample spectra.

Table 2.- Average k_0 -factor values obtained for "short-life" nuclides by "bare-monitor" and "Cd-subtraction" methods, using Certified Reference Materials SOIL-7 and SL-1.

Nuclides	Energy (keV)	k_0 (bare)	k_0 (Cd)	$k_{0,\text{sc}}$ (bare)	$k_{0,\text{sc}}$ (Cd)
^{51}Ti	319,8	$3,380 \cdot 10^{-4}$	$3,740 \cdot 10^{-4}$	$3,87 \cdot 10^{-4}$	$3,74 \cdot 10^{-4}$
^{56}Mn	846,6	$3,790 \cdot 10^{-1}$	$4,123 \cdot 10^{-1}$	$5,14 \cdot 10^{-1}$	$4,96 \cdot 10^{-1}$
^{27}Mg	1014,4	$1,716 \cdot 10^{-4}$	$9,347 \cdot 10^{-5}$	$1,02 \cdot 10^{-4}$	$9,80 \cdot 10^{-5}$
^{52}V	1433,9	$1,905 \cdot 10^{-1}$	$1,180 \cdot 10^{-1}$	$2,07 \cdot 10^{-1}$	$1,96 \cdot 10^{-1}$
^{42}K	1524,7	$1,110 \cdot 10^{-3}$	$1,110 \cdot 10^{-3}$	$1,00 \cdot 10^{-3}$	$9,46 \cdot 10^{-4}$
^{28}Al	1778,9	$1,656 \cdot 10^{-2}$	$1,636 \cdot 10^{-2}$	$1,85 \cdot 10^{-2}$	$1,75 \cdot 10^{-2}$

Table 3.- Correlation between the experimental and calculated $k_{0,Sc}$ -factors.

Method	Function	X-Y Correlation
Bare monitor	$y = 1.01x - 0.0011$	0.99962
Cd-subtraction	$y = 0.97x - 0.0017$	0.99954

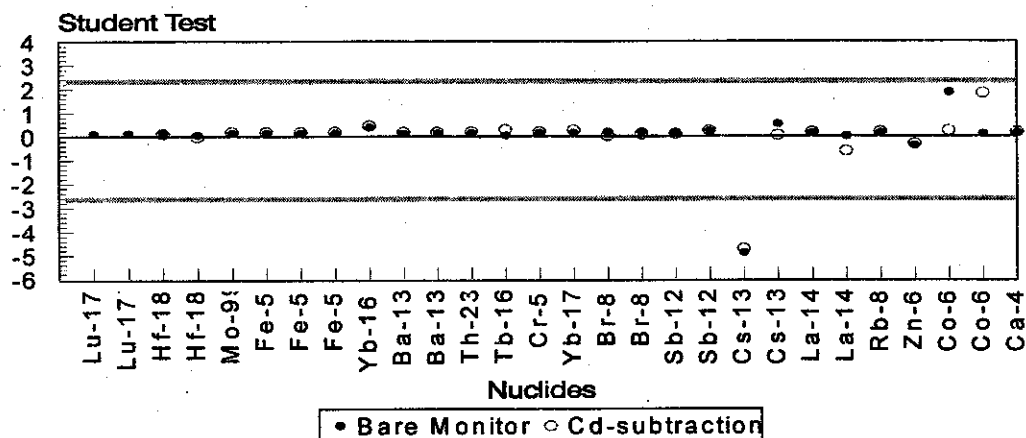


Figure 2.- Student distribution (95% confidence level) for determined $k_{0,Sc}$ -factors (nuclides order from Table 1).

Table 4.- Determined concentrations in the SOIL-7 for the comparative and the k_0 -methods, utilizing the MRC SL-1 as comparator.

Element	Average concentration (ppb)	Reported concentration (ppb) (7-8)
Lu	0.52 ± 0.07	$0.54^{*)}$
Hf	4.6 ± 0.9	4.16 ± 0.58
Mo	1.7 ± 0.2	$1.3^{*)}$
Fe (%)	6.52 ± 0.13	6.74 ± 0.17
Yb	3.52 ± 0.56	3.42 ± 0.64
Ba	600 ± 66	639 ± 53
Th	12.3 ± 0.9	14 ± 1
Tb	1.7 ± 0.4	$1.4^{*)}$
Cr	108 ± 12	109 ± 9
Br	— ^(*)	6.82 ± 1.73
Sb	1.36 ± 0.39	1.31 ± 0.12
Cs	6.97 ± 0.39	7.01 ± 0.88
La	51.1 ± 1.0	52.6 ± 3.1
Rb	105 ± 14	113 ± 11
Zn	239 ± 12	223 ± 10
Co	19.8 ± 1.2	19.8 ± 1.5
Ca (%)	— ^(*)	$0.25^{*)}$
Al (%)	4.7 ± 0.4	4.62 ± 0.07
V	66.0 ± 7.0	68.7 ± 1.9
Mg (%)	1.13 ± 0.05	2.25
Mn	631.0 ± 18.9	540.2 ± 16.7
Na	2.4 ± 0.1	2.5 ± 0.1

*) - Non-certified element in MRC SL-1.
 (*) - γ -lines no observed in the spectra.

$$T = \sum_i \frac{(k_{0,Sc} - K_{0,Sc})^2}{\sigma_i^2}$$

where σ_i is the expected standard deviation of each k_0 -factor and K_0 the weighted mean value. Figure 3 shows the obtained Heydorn Test for $k_{0,Sc}({}^{60}\text{Co}, 1173 \text{ keV})$ as an example.

The comparison of the experimental $k_{0,Au}$ -factors evaluated in this work with the experimental k_0 -factors, obtained using a high pure standards [1,5] (see Table 1), shows the feasibility of CRM use (with very careful spectra analysis) for k_0 -factor experimental determination.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors are grateful to the Consejo Nacional de Ciencia y Técnica (CONACyT) and National Nuclear Research Institute from Mexico for the partial financial support of this research. Thanks are due to the NNRI reactor group for their help during the experiments.

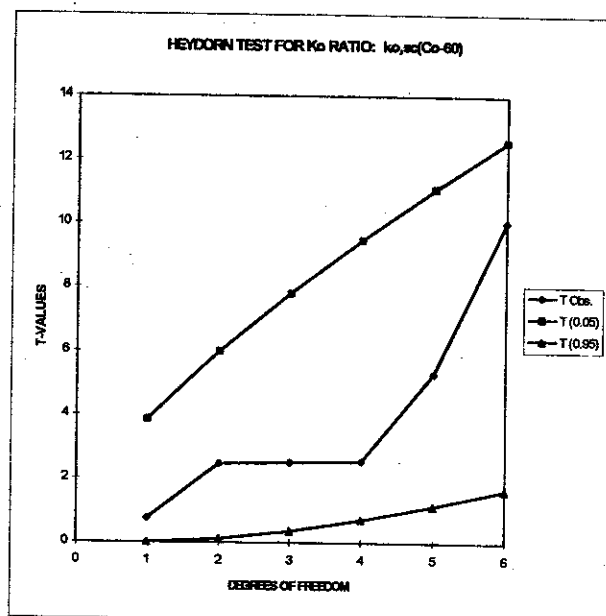


Figure 3.- An example of the Heydorn Test application for $k_{0,Sc}$ -factors

REFERENCES

1. F. DE CORTE. Ph. D. Thesis, University of Gent, Belgium, 1987.
2. A. SIMONITS, F. DE CORTE, J. HOSTE, J. Radioanal. Chem., 24 (1975) 31.
3. A. SIMONITS, F. DE CORTE, J. HOSTE, J. Radioanal. Chem., 31 (1976) 467.
4. L. MOENS, F. DE CORTE, A. DE WISPELAERE, J. HOSTE, A. SIMONITS, A. ELEK, E. SZABO, J. Radioanal. Chem., 82 (1984) 385.
5. F. DE CORTE, A. SIMONITS, F. BELLEMANS, M.C. FREITAS, S. JOVANOVIC, B. SMODIS, G. ERDTMANN, H. PETRI, J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles, 169/1 (1993) 125.
6. S.O. YUSUF, R.F. FLEMING, J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles, 179/1 (1994) 105.
7. L. PSZONICKI. Report IAEA/RL/112, Vienna, 1984.
8. R. DYBCZYNSKI, O. SUSCHNY. Report IAEA/TL/64, Vienna, 1974.
9. O. DIAZ, E. HERRERA, M.C. LOPEZ, I. ALVAREZ, M.V. MANSO, M. IXQUIAC. J. Radioanal. Nuc. Chem. Letters 220/1, 95-97. (1997).
10. A. PERDOMO, C. GARCIA. Spectrum Analyzer Programm. Institute for Nuclear and Technology, Havana, 1994.
11. S. ROTH, F. GRASS, F. DE CORTE, L. MOENS, K. BUCHTELA, J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles, 169/1 (1993) 159.
12. E. M. GRYNTAKIS, D.E. CULLEN, G. MUNDY. Handbook on Nuclear Activation Data, Tech. Repts. Ser. No. 273, IAEA, Vienna, 1987, p.199.
13. Z. SZATMARY. Data Evaluation Problem in Reactor Physics. Theory of Program RFIT, KFKI-1977-43.
14. K. HEYDORN, E. DAMSGAARD. J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles, 179/1 (1994) 87.

CÁLCULO DE LA ENERGÍA DE ASOCIACIÓN EN CLUSTERS DE ACETONA MEDIANTE LA APROXIMACIÓN DE LA HIPERSUPERFICIE DE MÚLTIPLES MÍNIMOS

Elsa Sánchez García¹, Luis A. Montero¹, José M. Hermida², Roberto Cruz³, Gerardo González⁴

¹Laboratorio de Química Computacional y Teórica, Facultad de Química, Universidad de La Habana,

²Departamento de Química Física, Universidad de Santiago de Compostela, España.

³Instituto Superior de Ciencias y Tecnologías Nucleares, Habana.

⁴Departamento de Farmacia, Universidad de Camagüey.

ABSTRACT

The present work outlines the calculation of the association properties of acetone. We use the Multiple Minima Hypersurfaces (MMH) approach to combine quantum chemical procedures for calculating energies with statistical thermodynamics for obtaining macroscopic quantities related to molecular association. In each case we built clusters with increasing amounts of acetone molecules and we explore their MMH's. After finding the shapes of minimal energy clusters, the thermodynamic functions were obtained by means of a program for statistical calculations. It has been introduced for the first time the calculation of molecular similarity to refine results.

RESUMEN

En el presente trabajo se desarrolla el cálculo de las propiedades de asociación del solvente acetona. Para ello utilizamos la aproximación MMH (Hipersuperficies de Múltiples Mínimos) que combina procedimientos químico- cuánticos para el cálculo de las energías con la termodinámica estadística para la determinación de las funciones termodinámicas de asociación. En cada caso construimos agregados moleculares o clusters formados por cantidades crecientes de moléculas de acetona y exploramos sus hipersuperficies de múltiples mínimos. Luego de encontradas las distribuciones moleculares de mínima energía se calcularon las funciones termodinámicas haciendo uso de programas de cálculo estadístico. Se introdujo por vez primera el cálculo de la similitud entre estructuras moleculares para refinar el procesamiento estadístico con resultados satisfactorios.

INTRODUCCIÓN

La aproximación de las Hipersuperficies de Múltiples Mínimos (MMH)¹ permite, como una de sus aplicaciones, el estudio de los efectos colectivos del ambiente molecular. Esta aproximación combina los procedimientos mecánico - cuánticos para el cálculo de las energías de agregados moleculares con la termodinámica estadística para la determinación de las propiedades termodinámicas de asociación de sistemas poliatómicos.

La acetona o propanona (C_3H_6O) es un solvente cuya utilidad industrial y comercial no es cuestionable. Por esa razón, ha sido objeto en los últimos años de un estudio muy cuidadoso en cuanto a sus interacciones con otros solventes y solutos². También existen estudios recientes de sus asociaciones mutuas desde el punto de vista puramente teórico³, e incluso algunos donde se desarrollan metodologías muy similares a las que se exponen en el presente trabajo⁴. Sin embargo, la

formación de agregados moleculares de la propia acetona no ha recibido la debida atención y esto puede tener una gran importancia para describir su comportamiento como solvente.

De este modo, exploramos las hipersuperficies de múltiples mínimos de sus agregados moleculares utilizando hamiltonianos mecánico- cuánticos aproximados. Los mínimos locales obtenidos corresponden a aquellos arreglos supermoleculares significativos para la descripción del sistema. Trabajamos entonces con fórmulas de la termodinámica estadística para calcular las energías de asociación.⁵

2.3.2 El modelo estadístico.

Considerando un ensemble compuesto por m agregados (clusters) o celdas moleculares del solvente acetona (*acetona*) _{n} a temperatura T y volumen V constantes, la ecuación de formación del mismo en cada caso es ¹:

$n \text{ acetona} = (\text{acetona})_n$

En términos estadísticos ⁶ y tomando como estado de referencia a las moléculas no asociadas, la energía interna, la entropía y la energía libre de Helmholtz de asociación de las moléculas pueden ser expresadas respectivamente como:

$$\Delta E_{\text{ass}} = E - \epsilon^{\text{ref}} = RT^2 \frac{q^*}{q} \quad \text{Ec (1)}$$

$$S_{\text{ass}} = R \ln q^* + \frac{\Delta E_{\text{ass}}}{T} \quad \text{Ec (2)}$$

$$\Delta F_{\text{ass}} = F - \epsilon^{\text{ref}} = -RT \ln q^* \quad \text{Ec (3)}$$

donde T es la temperatura en kelvins, R la constante de los gases expresada en J/mol·K y q^* es la función de partición molecular o sea, la suma de los pesos estadísticos de los estados correspondientes al conjunto dado, que se expresa como:

$$q^* = \sum_i g_i e^{\frac{-\Delta \epsilon_i}{RT}} \quad \text{Ec (4)}$$

Tal y como planteamos anteriormente, se selecciona como estado de referencia convencional una celda con el mismo número de moléculas no interactuantes y en el mismo estado roto-vibracional y traslacional que las moléculas asociadas. Esto implica asumir al proceso de asociación como isotérmico desde el punto de vista molecular¹. Por tanto, la energía de la celda respecto a la escala de referencia es:

$$\Delta \epsilon_i = \epsilon_i - \epsilon^{\text{ref}} = \epsilon_i - n \epsilon_{\text{acetona}} \quad \text{Ec (5)}$$

Siendo $\Delta \epsilon_i$ el término que aparece en la Ec (4).

La forma en que la energía de un sistema molecular varía con pequeños cambios en su estructura se describe como una hipersuperficie de energía potencial (HEP). Esta hipersuperficie es descrita por una serie de puntos estacionarios, llamados críticos, que corresponden a estructuras moleculares de interés químico. Por ello es recomendable explorar la HEP con vistas a encontrar aquellos arreglos moleculares que, con sus geometrías y energías respectivas, pueden formar un grupo de los estados significativos más importantes para las propiedades termodinámicas del sistema completo.

2.3.3 El cálculo de la energía.

En el estado actual de los métodos mecánico-cuánticos exige un esfuerzo computacional considerable el cálculo de la energía electrónica ϵ_i correspondiente a cada celda estadísticamente

significativa e incluyendo en cada caso, el número apropiado de moléculas de solvente. Si se utilizan los procedimientos SCF *ab initio* ordinarios aparecen varias dificultades:

- Se requiere un inmenso esfuerzo computacional, para calcular las energías totales de todas las celdas construidas para cada cluster de n moléculas de solvente. En el caso de los clusters de acetona de mayor tamaño, estos cálculos son impracticables, aún con los mejores recursos computacionales del mundo en la actualidad.

- Los efectos de correlación adquieren gran importancia tratándose de la energía de las interacciones de largo alcance entre moléculas separadas en cada celda.

- Se debe tener en cuenta el error de superposición de bases (BSSE) que usualmente tiende a sobrestimar las interacciones moleculares.

Por otra parte, es previamente impredecible, y posiblemente muy grande el número de cálculos de celdas diferentes necesario para seleccionar aquellas que representan un estado dado. Algunos cálculos previos de clusters de agua con un alto nivel *ab initio* corroboran estas consideraciones.⁷

Una alternativa viable es el uso de hamiltonianos semiempíricos ⁸ los cuales tienen las siguientes ventajas:

- Los cálculos se hacen mucho más rápidos, sobre todo en supermoléculas muy grandes.

- Los efectos de correlación están implícitamente considerados durante los procesos de parametrización con respecto a valores experimentales.

- Debido a la ortogonalidad de las funciones de base no aparece el error de superposición de bases (BSSE).

Esta es la razón por la cual se trabaja con un hamiltoniano semiempírico SCF-MO después de algunas correcciones empíricas para mejorar los resultados cuando nos enfrentamos a interacciones de largo alcance ⁹.

Para cada cluster de n moléculas de acetona, generamos series de ordenamientos aleatorios para ser procesados posteriormente con programas especialmente escritos para este trabajo¹⁰. Con el objetivo de construir los clusters de partida, una sola molécula fue colocada en el centro de coordenadas y tomada como dato de entrada. Luego se adicionaron moléculas de acetona alrededor de esta en un nuevo centro de coordenadas aleatorio

con respecto a la molécula inicial. Se desecharon aquellas nuevas moléculas generadas que se superpusieran con los volúmenes de Van der Waals de alguna otra ya existente. Los cálculos se llevaron a cabo con el programa MOPAC ¹¹.

RESULTADOS

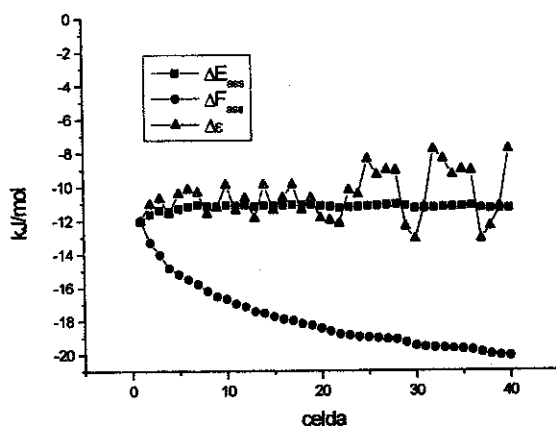
Para determinar la mejor n , fueron calculadas series de diferentes clusters cambiando el número de moléculas de acetona en cada uno. Partiendo del dímero, fuimos incrementando n de uno en uno hasta llegar al octámero. Entonces comenzamos a aumentar de dos en dos el número de moléculas de acetona hasta llegar al cluster de 12.

Las figuras 1 y 2 muestran los resultados de la optimización de 40 celdas del tetrámero de la acetona. El ordenamiento de estas sigue el mismo orden aleatorio con que fueron generados los arreglos supermoleculares que sirvieron de punto de partida para las optimizaciones geométricas.

En la figura 1 se muestran los resultados para las 40 celdas. Así vemos como varios valores de $\Delta\epsilon$ se repiten alrededor de -7, -11 y -13 kJ/mol. De este modo se evidencia que hay degeneración en las energías de estos arreglos supermoleculares. En estas hipersuperficies la degeneración puede ser de dos tipos:

i) Aquellas celdas que tienen la misma energía y el mismo ordenamiento molecular, o sea, las que se pueden considerar iguales tanto desde el punto de vista energético como geométrico. Este tipo de degeneración es indeseable ya que no aporta información nueva a la función de partición.

ii) Aquellas que tienen diferentes ordenamientos moleculares pero la misma energía. Entonces, si las celdas son realmente diferentes deben ser consideradas en la función de partición, aunque tengan valores de energías muy similares.



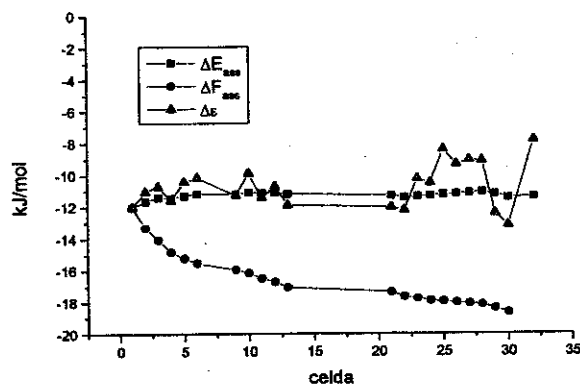
(1) Cluster de 4 moléculas de acetona.
Todas las celdas. T=298.15K

Ambos tipos de degeneración aparecen frecuentemente, sobre todo en clusters pequeños, que como es de esperar tienen menos posibilidades de presentar ordenamientos moleculares diferentes.

Como consecuencia de este análisis introdujimos el uso de un nuevo procedimiento de procesamiento estadístico. Hasta el momento disponíamos del programa Q que consideraba para el cálculo de las funciones termodinámicas de asociación todas las celdas fueran o no degeneradas. Posteriormente trabajamos con su versión Q1 que eliminaba todas las celdas con valores iguales o muy similares de energía pero no tenía en cuenta la posibilidad de que pudieran ser geoméricamente diferentes.

La nueva versión introducida, el programa Q2, toma todas aquellas celdas con energías muy similares y las compara desde el punto de vista geométrico. De este modo lleva a cabo el procesamiento estadístico con aquellos arreglos supermoleculares que contribuyen a la descripción del estado del sistema. Así, evitamos considerar celdas que no contribuyen a la función de partición (como se considerarían de utilizar el programa Q) y a su vez no eliminamos (a diferencia del programa Q1) aquellas que, aunque tengan la misma energía, son realmente diferentes.

En la figura 2 vemos entonces como se consideran sólo aquellas celdas que contribuyen verdaderamente a la función de partición del sistema, y como, de 40 celdas iniciales sólo 22 resultaron ser no degeneradas.

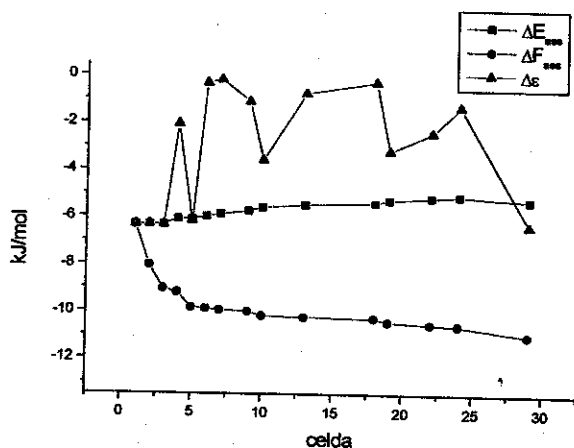


(2) Cluster de 4 moléculas de acetona.
Celdas seleccionadas. T=298.15K

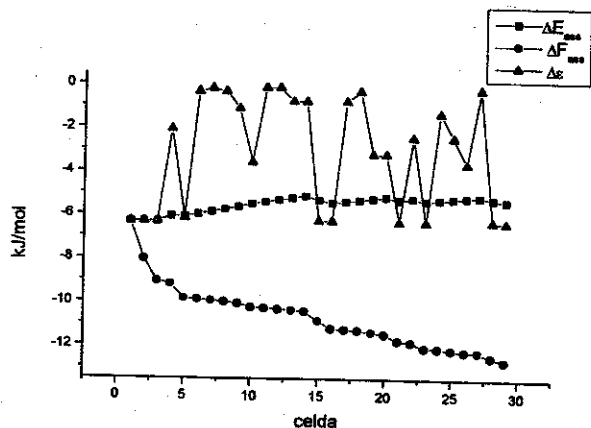
En este caso, la degeneración del tipo i) se elimina al rechazar aquellas series de celdas con una diferencia energética de menos de 0.096 kJ/mol con respecto a otra previamente considerada y que además se puedan considerar iguales desde el punto de vista geométrico. La consecuencia más

importante de esto es que evitamos un incremento artificial en la función de partición que provoca una disminución del valor de ΔF_{ass} , efecto que sería mucho menor en el caso de ΔE_{ass} porque esta función depende de la relación q^*/q^* . (ver ecs. 1-4).

Lo antes expuesto se evidencia no sólo al comparar las figuras 1 y 2, sino también se observa mucho mejor en el caso del dímero de la acetona, figuras 3 y 4. Para el dímero, de un total de 29 celdas optimizadas resultaron no degeneradas 14.



(4) Cluster de 2 moléculas de acetona.
Celdas seleccionadas T=298.15K



(3) Cluster de dos moléculas de acetona.
Todas las celdas. T=298.15K

Tanto la tabla I como la fig. 5 muestran la evolución de los valores de ΔE_{ass} y ΔF_{ass} con respecto al número n de moléculas de acetona en los clusters.

Así vemos como los clusters a partir de $n = 8$ se pueden considerar aquellos más representativos del proceso de asociación en el solvente acetona, o sea, aquellos capaces de representar los microestados de la acetona en un ensemble estadístico tipo canónico.

Tabla I. Valores calculados para $(\text{acetona})_n$ clusters*.

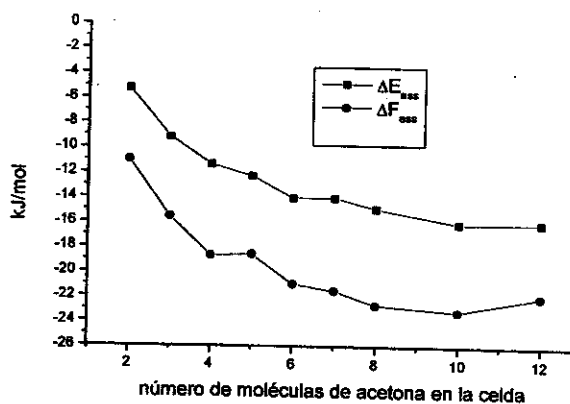
n	$\Delta E_{\text{ass Q2}}$ (kJ/mol)	$\Delta F_{\text{ass Q2}}$ (kJ/mol)	$\Delta F_{\text{ass Q}}$ (kJ/mol)
2	-5.3	-11.0	-12.7
3	-9.2	-15.6	-18.3
4	-11.4	-18.7	-20.1
5	-12.3	-18.6	-20.4
6	-14.0	-21.0	-21.1
7	-14.0	-21.5	-21.5
8	-14.9	-22.7	-22.9
1	-16.1	-23.2	-23.2
0			
1	-16.0	-21.9	-23.2
2			

ΔE_{ass} y ΔF_{ass} son la energía y la energía libre de asociación para cada tipo de cluster, calculadas con los programas Q y Q2 en el caso de ΔF_{ass} . (ver texto)

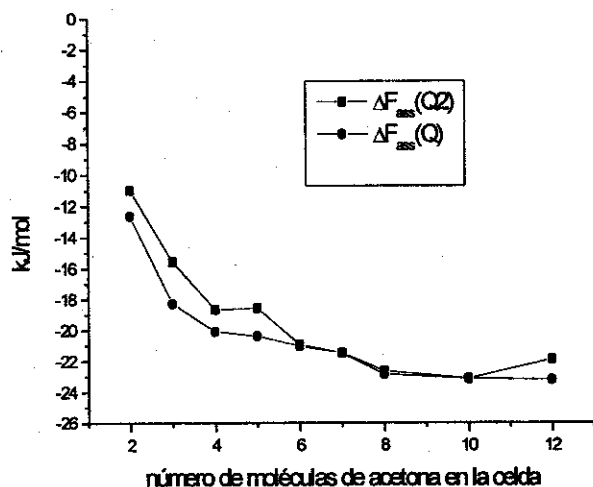
Sin embargo nos resultó de sumo interés el hecho de que, al analizar el comportamiento de los valores de ΔF_{ass} se observara un ligero incremento del valor de esta magnitud al pasar de $n=10$ a $n=12$. En la fig.6 aparece la variación de ΔF_{ass} con el número de moléculas de acetona en la celda al trabajar con los programas Q y Q2. Recordemos que el procesamiento con el programa Q implica considerar todas las celdas para el cálculo de la función de partición, sean degeneradas o no. Así, del análisis de este gráfico se destacan dos aspectos fundamentales:

1. Se observa un descenso artificial de los valores de ΔF_{ass} al comparar los resultados obtenidos con los programas Q2 y Q, respectivamente. Este hecho concuerda con lo planteado anteriormente.

2. Al considerar todas las celdas (programa Q) no se observa el aumento del valor de ΔF_{ass} en $n=12$ (figs. 5 y 6), sino que este se mantiene estable a partir de $n=8$.



(5) Energías de asociación
(obtenidas con el programa Q2) T=298.15K



(6) Energías libres de asociación obtenidas con los programas Q2 y Q. T=298.15K.

Analizando este hecho y la variación de S_{asy} correspondiente podemos considerar la posibilidad de que en clusters de $n=10$ moléculas de acetona existan conformaciones moleculares preferenciales que tiendan a estabilizar el sistema, con el consecuente descenso de ΔF_{asy} observado y la posterior desestabilización para $n=12$. En el caso de los resultados obtenidos al trabajar con el programa Q, que no selecciona configuraciones, este hecho no se pone de manifiesto. Estas son sólo consideraciones muy preliminares pero que pueden servir de base para futuras investigaciones.

CONCLUSIONES

Hemos mostrado nuestra experiencia en el cálculo de las energías de asociación en varios clusters de acetona mediante el tratamiento

estadístico de sus hipersuperficies de múltiples mínimos. Esta metodología puede constituir un paso de avance que ayude a comprender mejor las características de los efectos colectivos del ambiente molecular. Se utilizaron hamiltonianos mecánico- cuánticos semiempíricos partiendo de series de distribuciones moleculares aleatorias. Al seleccionarse las moléculas independientes como estado de referencia se hizo posible calcular los valores termodinámicos de asociación de sistemas reales, simplificando grandemente la función de partición.

El número mínimo de moléculas en el cluster, necesario para representar el ensemble canónico correspondiente, aparece a $n=8$. También se hizo evidente la importancia de llevar a cabo el procesamiento estadístico despreciando sólo aquellas conformaciones de clusters que aportan información repetida a la función de partición.

Queremos destacar además que la aproximación MMH ha sido utilizada tanto para el estudio de los procesos de asociación en otros solventes puros como agua, metanol y amoníaco como a la hora de abordar el proceso de solvatación en solutos polifuncionales⁵. De este modo se evidencia la capacidad de esta aproximación para abordar el estudio de los efectos colectivos del ambiente molecular en diversos sistemas.

AGRADECIMIENTOS.

Los autores queremos agradecer el apoyo del *Deutscher Akademischer Austauschdienst* (DAAD) en Alemania, de la *Third World Academy of Sciences* (TWAS Research Grant No. 97-144. RG/CHE/LA) y de la *Universidad de La Habana* en Cuba.

REFERENCIAS

- Montero L. A, J. Molina, J. Fabian, (1999): *International Journal of Chemistry*, aceptado para publicación
- Chan, T.C., N.L. Ma, N. Chen, (1997): *J. Chem. Phys.* **107** 1890; E. Matteoli, L. Lepori, *J. Chem. Phys.* **80** (1984) 2856; L.A. Curtiss, D.J. Frurip, M. Blander, *J. Phys. Chem.* **86** (1982) 1120; A.J. Stace, A.K. Shukla *J. Phys. Chem.* **86** (1982) 865.
- Lee E.P.F., J.M. Dyke (1992): *JCS Faraday Trans.* **88** 2111; S.A. Buzza, E.M. Snyder, A.W. Castleman *J. Chem. Phys.* **104** (1996) 5040.
- Thompson M.A. (1996): *J. Phys. Chem.* **100** 14492.
- Montero, L.A. A.M. Esteva, J. Molina, A. Zapardiel, L. Hernández, H. Márquez, A. Acosta, (1998): *J. Am. Chem. Soc.* **120** 12023.
- Matvéev, A.N. (1987): *Física Molecular*, Ed. Mir, Moscow, , p. 227.
- Jensen, J.O. P.N. Krishnan, L.A. Burke, (1995): *Chem. Phys. Lett.* **246** 13.

8. Dewar, M.J.S. , W. Thiel, (1977):*J. Am. Chem. Soc.* **99** 4907.
9. M.J.S. Dewar, E.G. Zoebisch, E.F. Healy, J.J.P. Stewart, *J. Am. Chem. Soc.* **107** (1985) 3902.
10. Montero, L.A. ,R. Cruz, E. Sánchez, (1999):*GRANADA and Q , Q1, Q2 Programs for PC computers*, Available on request.
11. Stewart ,J.J.P., (1993): MOPAC , v. 6, release for PC computers in the Laboratory of Computational and Theoretical Chemistry, Universidad de La Habana, and v. 7, implemented for IBM R6000/AIX systems.

ANÁLISIS FRACTAL : ALGUNAS APLICACIONES

Amelia Martín Rodríguez
Dpto. de Física del ISPJAE

RESUMEN

Las aplicaciones de los conceptos fractales se han ido extendiendo desde su aparición. Una importante razón para esto es la gran cantidad de técnicas que conllevan análisis de imágenes, pues en el estudio de esas imágenes todos los procedimientos que contribuyan a brindar información son bienvenidos. El análisis fractal, la determinación de la dimensión fractal de una estructura y de otras magnitudes relacionadas es una herramienta que se revela útil si se la sabe emplear, si se conoce su alcance. Hacemos una breve síntesis de las ideas de partida y explicamos aplicaciones concretas realizadas por nosotros y por otros autores.

ABSTRACT

Since their discovery fractals have been increasing its applications. A very important reason for this is the fact that many analysis techniques employ different kinds of images. Then, in order to study them any new procedure is welcome. Fractal analysis determination of fractal dimension and other related magnitudes might be a useful tool if you know how to use it. If you know its meaning. We do here a brief synthesis of the fundamental ideas and describe some applications done by us and other authors.

INTRODUCCIÓN

Está establecido que dentro de las técnicas de análisis de imágenes es conveniente conocer y aplicar el análisis fractal, por lo que consideramos adecuado contribuir a su desarrollo. Lo primero que debe conocerse bien es cuales son los principios del análisis fractal. (1, 2, 3)

Toda estructura (microestructura) que revele como propiedad de simetría la invarianza de escala aunque sea solamente en varios rangos es sospechosa de tener propiedades fractales que sean útiles para la detección de atributos o cambios en algunos de ellos al ocurrir procesos en los materiales. Esto es, el todo se parece a sus partes de manera mas o menos exacta. Ha sido observado que muchas formas naturales presentan esos parecidos, restringidos a algunos pocos cambios de escala. (4)

Si el objeto que se estudia es autosimilar en el sentido mencionado, puede ser considerado fractal y se le puede caracterizar por parámetros que han sido establecidos para otros problemas, como son la dimensión fractal, la entropía métrica, y los exponentes de Liapunov. El significado cualitativo de cada una de estas tres magnitudes es el siguiente :

- dimensión fractal en general mide cuanto contenido hay en el objeto fractal
- la entropía métrica mide cuan aleatorio es el comportamiento de la estructura
- los exponentes de Liapunov miden cuan alejadas están las trayectorias, o sea cuanta

divergencia entre trayectorias vecinas hay en el atractor fractal

El problema práctico de calcular parámetros que aporten datos y sean interpretables ha reducido en los trabajos que conocemos la determinación al caso de la dimensión. El cálculo de la entropía y de los exponentes de Lyapunov, en los casos que se ha hecho, requiere grandes series de datos, y es engorroso. Se recomienda cuando se estudian series temporales de la evolución de un proceso para el cual se obtiene un atractor fractal en el espacio de fases.

La determinación de la dimensión fractal de una estructura o imagen de la misma requiere seleccionar un método, desarrollar un algoritmo o varios para efectuarlo, diseñar un software que lo haga, interpretar el resultado, estableciendo de ser posible, comparaciones entre los resultados encontrados por los diversos algoritmos.

La dimensión fractal es un concepto genérico. Tiene su origen en las métricas matemáticas. Acercándonos mediante la intuición a la dimensión topológica, recordaremos que las dimensiones de líneas, cuadrados y cubos son respectivamente de uno, dos y tres. La generalización hecha por Mandelbrot, aprovechando la obra de Hausdorff, a la posible existencia de objetos geométricos de dimensiones intermedias entre esos valores enteros permitió extender la idea.

Un conjunto de métodos se ha ido desarrollando en las aplicaciones de todo tipo para estimar valores

de la dimensión . Se agrupan de modo general en las categorías :

- 1). Cambiando el nivel de grueso de los granos
- 2). Usando las relaciones de medida fractal
- 3). Usando la función de correlación
- 4). Usando funciones de distribución
- 5). Usando espectros de potencia

Veamos algunas ideas de estos métodos.

1). Cambio del nivel de grueso de los granos o "box counting methods" es un conjunto de técnicas que se basan en la idea de cubrimiento y conteo de probabilidad de que cierto punto pertenezca al conjunto.

2.- Usando las relaciones de medida fractal, teniendo en cuenta qué formas fractales darán lugar a dimensiones no enteras. Un ejemplo de esto es el caso de una masa con centro de distribución, y distribución uniforme a partir de ese centro, $M(r) \propto r^D$, M representa la cantidad de puntos del conjunto en función del radio de la distribución. Esto puede medirse y trazar los gráficos log-log de M vs r, siendo la pendiente el valor de cierta cota de la dimensión fractal.

3.- Empleando la función de correlación, que es una cantidad estadística importante.

Sea $r(x)$ la densidad en x de una cantidad que está distribuida aleatoriamente en el espacio. Se define : $C(r) = \langle r(x) r(x+a) \rangle$, y este promedio puede hacerse en un conjunto en x fijo o sobre el punto x. Si la distribución es uniforme e isotrópica, la función de correlación es una función sólo de la distancia entre los dos puntos. Su forma funcional puede ser una ley de potencias en la cual el exponente está relacionado con la dimensión fractal.

4.- Usando una función de distribución, por ejemplo, sea $P(r)$ la probabilidad de que un cráter escogido arbitrariamente tenga radio $> r$.

$$P(r) = \int_r^\infty p(s) ds; P(r) \propto P(\lambda r), \text{ con } \lambda > 0, \rightarrow P(r) \propto r^{-D}$$

La forma de potencia es la única forma funcional que satisface la invarianza de escala que se tiene al cambiar r por λr . D sería la dimensión fractal si r es una longitud.

5.- Usando el espectro de Fourier. Cuando se investiga el comportamiento estadístico de un proceso aleatorio temporal o espacial, se puede a menudo obtener el espectro de Fourier, $S(f)$ transformando y pasando a través de los filtros adecuados. Podemos juzgar a partir del espectro si una fluctuación dada es fractal o no.

Para el espectro, cambiar el nivel de la granulación en la observación corresponde a cambiar la frecuencia de corte. Como los fractales son invariantes ante cambio de escala, el espectro de una señal fractal debe ser invariante ante el cambio de la frecuencia de corte. El único espectro con esa propiedad es :

$$S(f) \propto f^{-\beta}, \beta = 5 - 2D, 1 < D < 2$$

D significa aquí la dimensión de una curva en el espacio bidimensional.

APLICACIONES

I. Determinación de la dimensión de una estructura dendrítica con centro de dispersión por método de relación de medida fractal del tipo :

$M(r) \propto r^D$ donde M es la cantidad de "masa " del objeto y r la arista de un cuadrado que se emplea para cubrir la estructura y hacer un conteo. La imagen se binariza, es decir lo que importa de ella es lo que le pertenece, no si hay texturas diferenciadas. El conteo se hace a partir del centro de la distribución y la "r" se hace tender a cero. Se plotea el gráfico log-log cuya pendiente nos da una cota de la dimensión fractal. Este procedimiento es aplicable a otras imágenes parecidas y permite determinar valores medios, 'normales', de la estructura. (2, 3, 5).

II. Análisis de texturas

Un aspecto importante del estudio de imágenes son los análisis de texturas. El análisis de imágenes reporta (6,7) que sólo con un parámetro no es posible diferenciar bien las texturas, pues diversas texturas con igual dimensión fractal tienen distinta apariencia. Estos y otros autores han desarrollado el concepto de lacunaridad para complementar el cálculo de dimensión. (7,8). Posteriores algoritmos se han desarrollado para mejorar los cálculos con ahorro de tiempo y mas casos diferentes abordados. (9).

III.- Determinación de la dimensión fractal de la frontera de grano de Zn.

Por uno de los métodos de conteo de cajas, el del " yardstick ", se halla la longitud de la frontera del grano previamente tratado para hacerla irregular. (10,11, 12).

III.- Características fractales de fracturas. Diversos autores reportan el estudio de estas estructuras y hacen la comparación entre los diferentes algoritmos usados (13,14).

REFERENCIAS

- 1) Benoit B. Mandelbrot, (1983): "*The Fractal Geometry of Nature*", Eds. W.H. Freeman and Company, New York.
- 2) Hideki Takayasu (1990): "*Fractals in the Physical Sciences*", Eds. Arun Holden, Center for Non Linear Studies, University of Leeds UK, Manchester University Press.
- 3) *Physica D*, (1989): (38): 1, to 3.
- 4) Bruce, J. West, (1990): "*International Journal of Modern Physics B*", (4): 10, 1629-1669.
- 5) A. Martín y otros, (1993): *Memorias Jornada de Retinosis Pigmentaria*, La Habana
- 6) Voss, R. (1984): *Random Fractals*, Plenum New York .
- 7) Pentland, A. P. (1984): et al, *IEEE Trans. Pattern Analysis Mach. Intell. PAMI* 6,
- 8) Keller, J. et al (1989): *Computer Vision, Graphics and Image Processing* 45, 150 166
- 9) Sarkar N. y B. Chaudhuri, *Pattern Recognition*. (25): 9, 1035 1041, 1992.
- 10) Tanaka M., (1992): *Journal of Materials Sciences*, 27, , 4717-4723.
- 11) Streitenberger P. et al., (1993): *Scripta Metallurgica et Materialia*, (33): 4., 541-546.
- 12) Martin A. y otros, (1999): *Revista Cubana de Física*, (16): 2
- 13) Louis, E. F Guinea, (1989): *Physica D*, 38, 235-241.
- 14) Fahmy, Y. et al, (1991): *J. Mat. Res.* Vol.6 no 9 sept.

SISTEMA DE ECUACIONES LINEALES EN CAMPOS GRAVITATORIOS DÉBILES

Lic. Lázaro Amoroso Rodríguez, Dr. José Andrés de la Cruz Alcaz *, Lic. Joaquín Argilagos Alvarez.
Departamento de Física. Instituto Superior Politécnico "José Antonio Echeverría"

ABSTRACT

The movement equations in the General Theory of Relativity corresponding to a particle in a weak gravitational field, let us appoint analogy with the movement equations of a charged particle in a electromagnetic field.

A study of this solutions let us appoint a deep analogy between gravitation and electromagnetism. As result of wich we can express the weak gravitational fields by a system of equations similar to the Maxwell's for the electromagnetism field.

This linear solutions let us a similar methodology in the study of gravitational and electromagnetic fields, and their simultaneous treatment in the Physical Courses.

RESUMEN

Las ecuaciones de movimiento de la Teoría General de la Relatividad correspondientes a una partícula en un campo gravitatorio débil, permite establecer determinada analogía con las de una partícula cargada en un campo electromagnético. Como consecuencia de este resultado se puede expresar el campo gravitatorio débil mediante un sistema de ecuaciones análogas a las de Maxwell para el electromagnetismo.

Estas soluciones lineales, con sus limitaciones, desde el punto de vista metodológico permiten estudiar comparativamente a los campos gravitatorio y electromagnético, facilitando su estudio simultáneo dentro de los cursos de Física.

DESARROLLO

En presencia de cuerpos cualesquieras, las ecuaciones del campo gravitatorio débil se reducen a la ecuación de ondas [1].

$$\frac{1}{2} \square \Psi_{ik} = -\frac{8\pi G}{C^4} \tau_{ik}, \quad (1)$$

$$\text{donde } \square = \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} - \frac{1}{C^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}; \quad i, k = 0, 1, 2, 3;$$

$\alpha = 1, 2, 3$; C : velocidad de la luz en el vacío,
 G : constante de gravitación

Sus soluciones corresponden a los potenciales retardados[1]

$$\Psi_{ik} = \frac{4G}{C^4} \int \tau_{ik} \left(t - \frac{R}{C}\right) \frac{dV}{R},$$

$$\text{donde } \tau_{ik} = T_{ik} - \frac{1}{2} \delta_{ik} T,$$

siendo τ_{ik} el tensor energía impulso.

La ecuación de movimiento de una partícula en un campo gravitatorio:

$$\frac{d^2 X_i}{ds^2} + \Gamma_{kj}^i \frac{dX_k}{ds} \frac{dX_j}{ds} = 0$$

en el caso de un campo débil se reduce a la expresión [2]:

$$\frac{d}{cdt} \left[\left(1 + \frac{\Psi_{00}}{2} \right) \frac{dX_i}{cdt} \right] = -\Gamma_{kj}^i \frac{dX_k}{cdt} \frac{dX_j}{cdt} \left(1 + \frac{\Psi_{00}}{2} \right), \quad (2)$$

donde Γ_{kj}^i corresponde a los símbolos de Christoffels y los potenciales retardados a las cantidades:

$$\Psi_{00} = -\Psi_{11} = -\Psi_{22} = -\Psi_{33} = \frac{2G}{C^2} \int \frac{\sigma dV}{R}$$

$$\Psi_{0\alpha} = \frac{4G}{C^3} \int \frac{J_\alpha dV}{R}$$

$$\Psi_{\alpha\beta} = 0$$

Siendo $J_\alpha = \sigma \frac{dX_\alpha}{dt}$, σ es la densidad volumétrica de masa y los símbolos de Christoffels [3], se reducen a:

* E-Mail: delacruz@electronica.ispjae.edu.cu

$$\Gamma_{00}^{\mu} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \psi_{00}}{\partial X_{\mu}} + \frac{\partial \psi_{0\mu}}{\partial X_0}$$

$$\Gamma_{\alpha 0}^{\mu} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \psi_{0\mu}}{\partial X_{\alpha}} - \frac{\partial \psi_{0\alpha}}{\partial X_{\mu}} \right)$$

$$\Gamma_{\alpha\beta}^{\mu} = 0$$

La ecuación de movimiento [3], empleando la notación vectorial toma la forma:

$$\frac{d}{dt} \left\{ \left(1 + \bar{\sigma} \right) \vec{V} \right\} = \text{grad } \bar{\sigma} + \frac{1}{C} \frac{\partial A_{\alpha}}{\partial t} + \frac{1}{C} \vec{V} \times \text{rot } \vec{A}, \quad (3)$$

en la cual se han definido respectivamente los potenciales escalar y vectorial como:

$$\bar{\sigma} = G \int \frac{\sigma dV}{R},$$

$$A_{\alpha} = -\frac{4G}{C} \int \frac{J_{\alpha} dV}{R}$$

En esta ecuación de movimiento, el término $1 +$

$\bar{\sigma}$ representa el aumento de la masa ponderable en presencia de otros cuerpos[3], y el primer miembro de la ecuación puede interpretarse como intensidad del campo gravitatorio. En ella los dos últimos términos se interpretan respectivamente como la acción inductiva de las masas en movimiento sobre el cuerpo considerado y la acción del campo de Coriolis.

Físicamente $\bar{\sigma}$ representa el potencial gravitatorio newtoniano, constituyendo el potencial escalar del campo gravitatorio y A_{α} puede interpretarse como su potencial vectorial.

I. Analogía entre las ecuaciones del movimiento de una partícula en un campo gravitatorio con las ecuaciones del movimiento de una carga en un campo electromagnético.

Las ecuaciones del movimiento de una partícula cargada en presencia de un campo electromagnético pueden expresarse como:

$$\frac{1}{q} \frac{d\vec{P}}{dt} = -\frac{1}{C} \frac{\partial A_{\alpha}}{\partial t} - \nabla \varphi + \frac{1}{C} \vec{V} \times \text{rot } \vec{A}, \quad (4)$$

Si comparamos (3) con (4) vemos que son completamente análogas, pudiéndose definir como

intensidades del campo gravitatorio y de Coriolis respectivamente a:

$$\vec{g} = -\nabla \varphi - \frac{1}{C} \frac{\partial A_{\alpha}}{\partial t}, \quad (5)$$

$$\vec{h} = \text{rot } \vec{A}, \quad (6)$$

Por lo cual (3) puede reescribirse como:

$$\frac{1}{m} \frac{d\vec{P}}{dt} = -\vec{g} + \frac{1}{C} \vec{V} \times \vec{h}, \quad (7)$$

$$\text{siendo: } \vec{P} = m \left(1 + \bar{\sigma} \right) \vec{V} \approx m \vec{V}$$

Adoptando (7) una forma análoga al caso electromagnético.

II. Sistema de ecuaciones lineales para el campo gravitatorio débil.

De las expresiones (5) y (6) es fácil deducir ecuaciones que contengan sólo a $\vec{g}$ y $\vec{h}$, que deben ser análogas a las ecuaciones de Maxwell.

Aplicando rotor a la ecuación (5) se obtiene:

$$\text{rot } \vec{g} = -\frac{1}{C} \frac{\partial \vec{h}}{\partial t}, \quad (8)$$

Al hallar la divergencia a la ecuación (6), resulta:

$$\text{div } \vec{h} = 0, \quad (9)$$

Al hacer actuar la divergencia en la expresión (5) e imponiendo el gauge análogo al de Coulomb, que $\text{div } \vec{A} = 0$, resulta:

$$\text{div } \vec{g} = 4\pi G \sigma, \quad (10)$$

Al aplicar el rotacional a la ecuación (6), y suponiendo un flujo estacionario de partículas, para el cual $\text{div } \vec{J} = 0$, se obtiene:

$$\text{rot } \vec{h} = \frac{16\pi G}{C} \vec{J}, \quad (11)$$

$$\text{donde } \vec{J} = \sigma \vec{V}$$

Así queda constituido el sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{aligned} \text{div } \vec{g} &= 4\pi G \sigma, & \text{div } \vec{h} &= 0, \\ \text{rot } \vec{g} &= -\frac{1}{C} \frac{\partial \vec{h}}{\partial t}, & \text{rot } \vec{h} &= \frac{16\pi G}{C} \vec{J} \end{aligned} \quad (12)$$

Para los procesos no estacionarios, la ecuación de continuidad exige que:

$$\nabla \cdot J + \frac{\partial \sigma}{\partial t} = 0,$$

Y por analogía con la generalización de la ley de Ampere en el caso electromagnético, se requiere generalizar para el caso no estacionario a la ecuación (11), obteniéndose:

$$\text{rot } \vec{h} = \frac{16\pi G}{C} J + \frac{4}{C} \frac{\partial \vec{g}}{\partial t}$$

Se obtiene así un sistema de ecuaciones lineales para el campo gravitatorio débil análogo al sistema de ecuaciones de Maxwell para el campo electromagnético.

$$\begin{aligned} \text{div } \vec{g} &= 4\pi G\sigma, & \text{div } \vec{h} &= 0, \\ \text{rot } \vec{g} &= -\frac{1}{C} \frac{\partial \vec{h}}{\partial t}, \\ \text{rot } \vec{h} &= \frac{16\pi G}{C} J + \frac{4}{C} \frac{\partial \vec{g}}{\partial t} \end{aligned} \quad (13)$$

Estas ecuaciones no admiten en contraposición al segundo par de ecuaciones de Maxwell [4], una formulación covariante de la forma:

$$\frac{\partial F_{ik}}{\partial X_k} = \frac{4\pi}{C} J_i,$$

donde F_{ik} es el tensor del campo electromagnético y J_i es el cuadvectores de densidad de corriente. Esta imposibilidad radica en los coeficientes de las ecuaciones:

$$\text{div } \vec{g} = 4\pi G\sigma, \text{rot } \vec{h} = \frac{16\pi G}{C} J + \frac{4}{C} \frac{\partial \vec{g}}{\partial t}$$

Las ecuaciones de onda que se obtienen para el sistema de ecuaciones (13), son:

$$\Delta \vec{h} - \frac{4}{C^2} \frac{\partial^2 \vec{h}}{\partial t^2} = \vec{0}, \quad \Delta \vec{g} - \frac{4}{C^2} \frac{\partial^2 \vec{g}}{\partial t^2} = \vec{0}$$

cuyo resultado es que la velocidad de propagación de estos campos es $C/2$.

Así, en la aproximación de campos gravitatorios débiles se ha perdido la covarianza del sistema de ecuaciones (13). Es decir, a partir del sistema de ecuaciones del campo gravitatorio no es posible deducir un sistema lineal de ecuaciones análogas a

las de Maxwell. Para ello es necesario redefinir el potencial vectorial gravitatorio como:

$$A_a = -\frac{G}{C} \int \frac{J_a dV}{R}$$

Con esto se obtiene el sistema de ecuaciones lineales y covariantes

$$\begin{aligned} \text{div } \vec{g} &= 4\pi G\sigma, & \text{div } \vec{h} &= 0, \\ \text{rot } \vec{h} &= \frac{4\pi G}{C} J + \frac{1}{C} \frac{\partial \vec{g}}{\partial t}, \\ \text{rot } \vec{g} &= -\frac{1}{C} \frac{\partial \vec{h}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (14)$$

de donde las correspondientes ecuaciones de onda, muestran C como su velocidad de propagación.

CONCLUSIONES

A partir de cierta analogía entre el campo electromagnético y el gravitatorio débil, se obtiene un sistema de ecuaciones lineales para el campo gravitatorio análogo al sistema de ecuaciones de Maxwell, pero no resulta covariante.

Una redefinición apropiada del potencial vectorial gravitatorio, permite hacer una presentación del campo gravitatorio con una metodología similar a la dedicada al estudio del campo electromagnético. Esta formulación lineal del campo gravitatorio queda por evaluar si efectivamente lo describe con la misma rigurosidad como el sistema de ecuaciones de Maxwell al campo electromagnético.

En la teoría de la gravitación, el campo de Coriolis aparece como una forma de manifestarse el campo gravitatorio, debido al movimiento relativo, algo completamente análogo en el caso del campo electromagnético.

La existencia del término $\frac{1}{C} \frac{\partial \vec{g}}{\partial t}$ que por analogía con el campo electromagnético lo podemos considerar como una corriente de desplazamiento, permite concebir la propagación del campo gravitatorio como una onda transversal caracterizado por las magnitudes $\vec{h}$ y $\vec{g}$.

La ecuación $\text{div } \vec{h} = 0$, según la interpretación análoga a la electrodinámica es que no existen monopolos del campo de Coriolis. Desde el punto de vista de la mecánica está clara la imposibilidad de existencia de estos monopolos, idea que puede trasladarse al caso electromagnético y justificar la no existencia del monopolo magnético.

REFERENCIAS

- [1]. Landau y Lifshitz. Teoría Clásica de los Campos. Curso de Física Teórica. Volumen 2. Editorial Reverté, S. A. 1966. Pág. 420.
- [2]. Einstein A. The Meaning of Relativity. Science Paperbacks, 1967. Pág. 96.
- [3]. Einstein Albert. The Meaning of Relativity. Obra Citada. Pág. 97.
- [4]. Landau y Lifshitz. Teoría Clásica de los Campos. Obra Citada. Pag. 97.

INTRODUCCION AL PROBLEMA DE LOS FUNDAMENTOS DE LA MECANICA CUANTICA

Angelo Baracca, Departamento de Física, Universidad de Florencia

LA FORMULACION "ORTODOXA" Y SUS OPOSITORES

La formulación "ortodoxa" de la mecánica cuántica -llamada también la "interpretación de Copenhague"- marcó una ruptura profunda con respecto a las concepciones físicas tradicionales y al modo de concebir el mundo. Ya con la llamada "vieja teoría cuántica" (o sea los nuevos conceptos introducidos en la primera década de este siglo por Planck, Einstein, Nernst y otros) se había producido una primera superación radical del enfoque mecanicista y reduccionista que había dominado en la física del siglo precedenteⁱ. Pero aquellos mismos conceptos y enfoque tan novedosos fueron a su vez literalmente trastornados por los fundadores de la formulación ortodoxa de la teoría (Bohr, Heisenberg, Born, Pauli, Jordan, Dirac y otros): en tal medida que muchos de los originarios "fundadores" se convirtieron en opositores de la mecánica cuántica. Es importante subrayar que esta oposición no sostenía que la teoría sea equivocada, sino que ella no puede ser la descripción completa y definitiva de los fenómenos atómicos y sub-atómicos: Einstein, de Broglie, Schrödinger criticaban el enfoque de base de la mecánica cuántica, sus elecciones *a priori*, sus implicaciones subjetivas. La característica basilar de la forma de pensar de estos físicos era el requisito de una *descripción espacio-temporal* de los procesos físicos, aunque ella ya no fuese de tipo mecanicista "clásico".

Al contrario Bohr afirmaba explícitamente lo contrario, por ejemplo:

...no se requiere ninguna descripción precisa del comportamiento espacio-temporal de los procesosⁱⁱ. [1927]

Estamos aquí tan lejos de una descripción causal, que incluso se podría

decir que un átomo en un estado estacionario tiene la posibilidad de elegir libremente entre varias transiciones posibles a otros estados estacionariosⁱⁱⁱ. [1929]

En Heisenberg se encuentran afirmaciones aún más subjetivistas:

...lo que observamos no es la naturaleza en sí, sino la naturaleza sometida a nuestro modo de interrogarla. [1958].

Dirac pone como premisa en su tratado de mecánica cuántica la necesidad de renunciar a los conceptos intuitivos de nuestra experiencia directa en el espacio y en el tiempo:

La tradición clásica consideraba el universo como una asociación de entidades observables en movimiento según leyes definidas de fuerzas, de modo de formarse un *modelo mental en el espacio y en el tiempo*...

Las leyes fundamentales gobiernan un substrato de que *no podemos formarnos un modelo mental* sin introducir inexactitudes. [Cursivas mías]

La reacción de Einstein en contra de estas tendencias e interpretaciones llega a ser sarcástica en una carta a Max Born de 1924:

La idea de que un electrón liberado por un rayo de luz pueda escoger a *su antojo* el instante y la dirección del vuelo me resulta intolerable. Si así resultara, finalmente preferiría haber sido zapatero, o incluso empleado de casino, antes que un físico^{iv}. [Cursiva mía]

Por otro lado, Oskar Klein recuerda que Bohr "no podía resignarse al concepto Einsteiniano del cuanto

ⁱ Véase por ejemplo mi escrito: A. Baracca, *Las raíces de la revolución científica del siglo XX*, Facultad de Física, Universidad de La Habana, 1998.

ⁱⁱ N. Bohr, ed. Ital. *Teoria dell' Atomo e Conoscenza Umana*, Torino, 1961, p. 337.

ⁱⁱⁱ N. Bohr, *ibidem*.

^{iv} Véase por ejemplo mi escrito: A. Baracca, *Las raíces de la revolución científica del siglo XX*, Facultad de Física, Universidad de La Habana, 1998.

de luz^v (cabe recordar que la prevención general ante este concepto permaneció muy radicada aún mucho después de la confirmación de las leyes del efecto fotoeléctrico por Millikan en 1916: contra lo que ingenuamente pudiera pensarse, el trabajo y los resultados de Planck del año 1900 fueron más aceptados^{vi}).

Schrödinger expresó puntos de vista semejantes, con consideraciones generales interesantes sobre las finalidades culturales de la ciencia:

El punto de vista de Bohr, según el cual una descripción espacio-temporal es imposible, lo rechazo *al límite*. La física no consiste solo en investigación atómica, la ciencia no solo en física y la vida no solo en ciencia. El objetivo de la investigación atómica es la integración de las respectivas *experiencias* en el pensamiento común. Este pensamiento común se desenvuelve en el espacio y en el tiempo en cuanto a que se refiere al mundo externo. Si no se logra la integración en el espacio y en el tiempo, entonces no se obtuvo el objetivo y uno no sabe qué objetivo se ha conseguido.^{vii} [1926]

En efecto, Schrödinger formuló su ecuación como una teoría puramente ondulatoria, que debía tratar los aspectos ondulatorios de la materia en el espacio y en el tiempo, en términos continuos:

En este artículo quisiera mostrar en primer lugar en el caso más simple del átomo de hidrógeno, que la usual regla de cuantización puede ser remplazada por otra condición, en la que no se mencionan más "enteros". La propiedad integral sigue en cambio en el mismo modo natural en que el número de nudos de una cuerda vibrante tiene que ser entero. La nueva interpretación

puede ser generalizada y, yo creo, centra mucho más en profundidad en la verdadera naturaleza de las reglas de cuantización.^{viii}

El nunca aceptó la interpretación y la utilización que la mecánica cuántica ortodoxa hizo de su ecuación^{ix}.

Mi opinión es que en efecto se operó una elección básica en la "formulación ortodoxa", de la mecánica cuántica^x; la de limitar la estructura y la tarea de la teoría física a *correlar hechos experimentales, resultados de mediciones*, incluso renunciando a preguntarse lo que pasa en el sistema entre una medida y la siguiente, o sea renunciando a describir su evolución espacio-temporal. Bohr lo ha expresado a menudo de forma muy clara:

El *objeto* de nuestra descripción de la naturaleza no es tanto discernir la *esencia real* de los fenómenos como *buscar y encontrar*, hasta tan lejos como sea posible, relaciones entre los variados aspectos de nuestra experiencia.^{xi} [1963: cursivas mías]

Una base probabilística para esta correlación apareció como una estructura mucho más flexible, eficaz, operativa en comparación con la búsqueda de una descripción de la evolución en términos espacio-temporales.

Sin embargo, tanto Schrödinger como (y sobre todo) Einstein no se limitaron a una crítica ideológica de la formulación ortodoxa, y buscaron situaciones físicas que llevasen a conclusiones paradoxales, de forma tal de demostrar el carácter incompleto de la *tratación* cuántica y la necesidad de completar dicha *tratación* con otros elementos que la volviesen en una descripción en términos de evolución espacio-temporal: es conocida la paradoja del "gato de Schrödinger"^{xii}, mientras que Einstein en el mismo

^v En S. Rozental (Ed.), *Niels Bohr*, Amsterdam, North-Holland, 1967, p. 77.

^{vi} Véase, por ejemplo, L. Navarro Verguillas, *Einstein Profeta y Hereje*, Tusquets, Barcelona, 1990, pp. 111-113.

^{vii} Citado por K. von Meyenn, in AA. VV., *El Siglo de la Física*, (Edición de L. Navarro Verguillas); Tusquets, Barcelona, 1992, p. 233.

^{viii} E. Schrödinger, *Ann. Phys.*, 79, 361, 489 y 734 [Traducción al Inglés en G. Ludwig, *Wave Mechanics*, Pergamon Press, 1968]: en términos intuitivos esto se ve razonando en términos de estacionariedad de la onda asociada de Broglie para una partícula en un volumen finito, o en el estado fundamental de átomo de hidrógeno.

^{ix} Véase el artículo de P. Forman y V.V. Raman, "Why was it Schrödinger who developed de Broglie's ideas", *Historical Studies in the Physical Sciences*, 1, 291, 1969. En el año 1952 Schrödinger publicó un artículo con el título muy significativo: "Are there quantum jumps?". Heisenberg recuerda una anécdota divertida: en 1926 Bohr invitó a Schrödinger en Copenhague con la finalidad de convencerlo, con "discusiones infinitamente laboriosas" durante las cuales Schrödinger, que había caído enfermo, exclamó desesperado "Si no se puede prescindir de estos malditos saltos cuánticos, lamento de haberme aún ocupado de la teoría cuántica" [W. Heisenberg, in L. Rosenfeld y V. Weisskopf (Editors), *Niels Bohr*, Pergamon Press, 1955, p. 14; S. Rozental (Editors), *Niels Bohr*, North-Holland, 1967, p. 103]

^x En efecto varios estudios han subrayado el influjo de corrientes de pensamiento irracionalistas y subjetivistas (Heidegger, Kierkegaard) sobre los físicos que formularon la mecánica cuántica: P. Forman: "Weimar culture, causality and quantum theory 1918-1927: adaptation by German physicists to a hostile intellectual environment", *Historical Studies in the Physical Sciences*, 3, 1, 1971 [Traducción al Español: *Cultura en Weimar, Causalidad y Teoría Cuántica, 1918-1927: Adaptación de los Físicos y Matemáticos Alemanes a un entorno Intelectual Hostil*, Alianza Editorial, Madrid, 1984]; L. Rosenfeld, *Osiris*, 2, 149, 1963; M. Jammer, *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, 1966, pp. 166-180.

^{xi} Citado por F. Rohrich, "Las interacciones ciencia-sociedad a la luz de la mecánica cuántica y de su interpretación", En *El Siglo de la Física*, op. cit., p. 135.

^{xii} E. Schrödinger, *Naturwissenschaften* 28, 807, 823 y 844 (1935), traducido al Inglés en J.A. Wheeler y W. Zurek, *Quantum Theory of Measurement*, Princeton University Press, 1983.

año 1935 formuló la "paradoja EPR", o sea de Einstein, Podolsky y Rosen^{xiii}. Einstein además propuso la idea de que existan "variables ocultas", cuya introducción completaría la tratación de la mecánica cuántica, eliminando así los aspectos insatisfacentes y recuperando una descripción física causal.

También es conocida la dificultad relacionada con el proceso de medición, o sea con el postulado de la así dicha "reducción" o "colapso de la función de onda"; o sea, si se mide una observable A de un sistema y se encuentra el valor a_i , el sistema debe encontrarse en el estado $|a_i\rangle$ del operador A . El problema surge si se intenta describir el proceso de medición mismo - o sea la interacción del sistema con el aparato de medición - con el formalismo de la mecánica cuántica: no se obtiene, en efecto, el colapso de la función de onda en el estado $|a_i\rangle$.

En este escrito intentaré enfocar la naturaleza común de estos problemas, en su base formal, y discutir la peculiaridad de la mecánica cuántica, su intrínseco carácter *non local*, que hace de ella una teoría irreducible a un enfoque clásico. Sobre estos problemas ya la literatura es inmensa, y nos limitaremos a delinear algunos aspectos principales^{xiv}.

La paradoja del "gato de Schrödinger"

Empezaremos por la forma en que Schrödinger expresó su crítica a la formulación ortodoxa, porque es la más sugestiva (aún si está sujeta a fáciles objeciones) y hace entender de forma intuitiva cuál es el problema fundamental. El objetivo de Schrödinger es hacer una *reducción ad absurdo* con la mecánica cuántica.

El experimento teórico considera en un cuarto cerrado un gato en presencia de un núcleo radioactivo: si el núcleo decae, la partícula que emite dispara un dispositivo que abre una cápsula que contiene veneno y mata instantáneamente al gato. Suponemos que al gato se le pueda asociar un "estado", o sea de "gato vivo" o de "gato muerto": el estado del gato está correlado con el estado del núcleo inestable. Pero la emisión de la partícula sigue unas leyes probabilísticas: durante un cierto intervalo de tiempo hay una probabilidad determinada de que el núcleo haya decaído, y entonces el núcleo se encuentra en una superposición lineal de estados de "núcleo íntegro" y de "núcleo decaído", con coeficientes cuyo módulo al cuadrado corresponden a las respectivas probabilidades. Por lo tanto, el gato también se encontrará en una superposición de estados de "gato vivo" y de "gato muerto"

$$|\Psi_{\text{Gato}}\rangle = c_v |\Psi_{\text{vivo}}\rangle + c_m |\Psi_{\text{muerto}}\rangle \quad (1)$$

Es sólo cuando el observador abre el cuarto y observa el gato, este "precipita" en el estado de "gato vivo" o *bien* en el de "gato muerto": es como si el observador matara el gato, al observarlo! Schrödinger criticaba al mismo tiempo el carácter de la correlación que la mecánica cuántica establece, y el papel del observador en hacer una medida.

Una objeción obvia al razonamiento de Schrödinger es naturalmente el hecho de que él asigna al gato un "estado" cuántico: por lo menos el gato, en tanto que es un sistema microscópico, no es en un "estado puro" y no puede ser descrito por una función de onda, sino que se ha de describir en términos de una mezcla de estados, en el sentido de la mecánica estadística, o sea una "matriz densidad". Pero veremos que tampoco por esta vía es fácil salir de la dificultad.

La naturaleza de la correlación entre dos sistemas cuánticos

De todos modos es fácil traducir la situación del gato y el núcleo inestable para dos sistemas macroscópicos: esta situación pondrá de manifiesto la naturaleza de la dificultad.

Consideremos entonces un sistema de dos cuerpos microscópicos preparado de forma tal que los estados de los dos cuerpos sean correlados. Por ejemplo, consideremos una partícula de espín 0 que decae en dos partículas de espín $\frac{1}{2}$, tal como dos electrones, o un electrón y un positrón (un caso concreto es el positronio, otro es un mesón π^0 que decae en dos fotones, quienes tienen sólo dos estados de polarización). Las dos partículas, aunque se alejen, antes de interactuar con otros sistemas, permanecen correlados de forma tal que sus espines tienen que estar orientados en direcciones opuestas: este estado del sistema de las dos partículas es bien conocido en mecánica cuántica, y es el "estado de singlete"

$$|\Psi_0\rangle = 1/\sqrt{2} \{ |u_+\rangle |v_-\rangle - |u_-\rangle |v_+\rangle \} \quad (2)$$

Hay una primera cosa que subrayar en esta expresión: *a ninguna de las dos partículas se le puede asignar un estado*: en efecto, es fácil darse cuenta que el estado (2) del sistema compuesto no se puede expresar en forma de un producto de dos estados de las dos partículas $\{a_+ |u_+\rangle + a_- |u_-\rangle\} \{b_+ |v_+\rangle + b_- |v_-\rangle\}$. El ejemplo del gato expresaba de forma absurda esta propiedad.

^{xiii} A. Einstein, B. Podolsky y N. Rosen, *Phys. Rev.* 47, 477 (1935).

^{xiv} Una referencia muy interesante, de que recomendamos la lectura, es el volumen colectivo, editado por L. Navarro Verguillas, que hemos citado en la nota 7, *El Siglo de la Física*, Barcelona, Tusquets, 1992: principalmente los artículos de S. Bergia, F. Rohrllich y K. von Meyenn.

Suponemos ahora que las dos partículas correladas en el estado (2) se alejen mucho la una de la otra. Ninguna de las dos se encuentra en un estado definido: entonces no podemos decir cuál será el valor de la proyección del espín de cada partícula en una dirección cualquiera. La situación se más bien parecida a la del gato: si hacemos una medida de la proyección del espín de cada partícula, encontraremos el 50 % de valores de espín hacia arriba, y el 50 % hacia abajo. Sin embargo, si medimos el espín de una de las dos partículas, también el espín de la otra resultará determinado, *sin que hayamos interactuado en ninguna forma con ella*. ¡Es como si una señal se haya propagado instantáneamente - o sea con velocidad infinita - de una partícula a la otra, llevando la información del valor de su espín!

La crítica de Einstein, Podolsky y Rosen

En la base de este ejemplo se puede entender también la esencia de la crítica de Einstein, Podolsky y Rosen. Los autores se preguntaban si la descripción del mundo que ofrece la mecánica cuántica se puede considerar *completa*. El significado atribuido al término "completo" se especificaba en la frase: "Todo elemento de la realidad física debe tener una contrapartida en la teoría física". Por el término "elemento de la realidad física" los autores proponen una definición con valor operativo:

Si podemos predecir con certeza (o sea con probabilidad igual a 1) el valor de una magnitud física, sin perturbar un sistema en absoluto, entonces existe un elemento de realidad física correspondiente a esa magnitud física.

¿A qué contexto se refiere esta definición? Al contexto en que se supone que un oponente opine que cierta magnitud atribuible a un sistema físico no tenga un valor definido antes de la medición (y nuestra discusión precedente aclara que a esto se refiere): entonces a esa magnitud no le correspondería a un elemento de realidad física. A este oponente le dicen los autores: ¿pero qué dirías al respecto si, sin perturbar el sistema físico, yo pudiera prever con exactitud el valor de esta magnitud? Este conocimiento previo y cierto nos hace pensar en la magnitud como un elemento de realidad.

El núcleo del artículo radicaba en un experimento conceptual que no era muy distinto conceptualmente de lo que hemos discutido en el párrafo precedente, Ecuación (2) [esta formulación se debe a D. Bohm en

1951]. Ahora bien, con medir el espín de una de las dos partículas, podemos predecir con certeza el espín de la otra, sin perturbarla físicamente de ninguna forma cuando estén suficientemente separadas. Entonces este debía ser un elemento de la realidad física aún antes que se hiciera la medición sobre la otra partícula (tal como el gato debe estar "vivo" o "muerto" antes que observemos si el núcleo se ha desintegrado); la mecánica cuántica no reproduce esta conclusión y por lo tanto da una descripción incompleta de la realidad. EPR empujaban más allá el razonamiento: si se mide la proyección del espín de la primera partícula en la dirección z podemos predecir con certeza el espín de la segunda: por otro lado, efectuando una medición de la proyección del espín de la primera partícula en la dirección x se puede predecir con certeza el de la segunda. Las dos observaciones pueden tener lugar sin perturbar el segundo sistema, a las dos proyecciones del espín se le pueden hacer corresponder, por tanto, elementos de realidad física: pero en la teoría los operadores mecánico-cuánticos que corresponden a la proyección del espín en dos direcciones distintas no conmutan y las variables asociadas no pueden tener, al mismo tiempo, un valor definido.

Bohr replicó inmediatamente al artículo de EPR, en la misma revista, con un trabajo que llevaba el mismo título. La réplica de Bohr se basaba en el principio de complementariedad de la mecánica cuántica: la discusión entre Bohr y Einstein se parece a un diálogo entre sordos. Según Bohr "un criterio de realidad como el propuesto por los autores contiene - por muy cautelosa que pueda parecer su formulación - una ambigüedad esencial cuando se aplica a los problemas efectivos de los que aquí nos ocupamos". La ambigüedad consistiría en que, según el principio de complementariedad, medidas de observables incompatibles (que no conmutan) presuponen la predisposición de aparatos diferentes (complementarios). Por ejemplo, para medir una proyección del espín de la primera partícula se ha de permitir una iteración esencialmente incontrolable con un soporte, de esta manera se nos cierra cualquier posibilidad futura de aplicar la ley de conservación del momento angular al sistema de las dos partículas y por ello se pierde la única base de que disponíamos para hacer una predicción concerniente al espín de la segunda partícula. Se puede decir que en el formalismo de la mecánica cuántica Bohr tiene razón: pero es propiamente este formalismo que Einstein rechazaba, o mejor dicho, que consideraba incompleto^{xv}.

^{xv} Para darse cuenta de las posiciones de Einstein y de Bohr y de cómo se había desarrollado la discusión entre ellos antes del año 1935 se recomienda la lectura de sus artículos en el volumen colectivo editado por P.A. Schilpp, *Albert Einstein: Philosopher-Scientist*, Open Court, Illinois, 1949 (la autobiografía de Einstein, incluida en este volumen, ha sido traducida al castellano: *Notas Autobiográficas*, Alianza, Madrid, 1984). En particular la contribución de Bohr reconstruye el desarrollo de las discusiones con Einstein. En particular, él cuenta una anécdota divertida. En una Conferencia, Solva y Einstein habían presentado un experimento conceptual con el que se podía determinar con exactitud la energía y el instante en que un fotón es emitido, sobre la base de la relación masa-energía, pesando la caja de la que el fotón sale. Bohr pensó en el experimento en la noche y se dió cuenta de que ¡Einstein no había tenido en cuenta ... la relatividad general! Si se toma en cuenta que la balanza baja en el campo gravitacional, la relación de incertidumbre de Heisenberg se recupera.

El problema de la medida

Podemos ahora discutir brevemente el problema de la medida, porque la sustancia no es muy distinta de lo que venimos a discutir.

En primer lugar definimos la propiedad de un sistema que sirva como aparato de medida de una magnitud microscópica S de un sistema atómico, descrita por un operador S que tenga un sistema de autovalores s_i y de autofunciones $|s_i\rangle$

$$S |s_i\rangle = s_i |s_i\rangle \quad (3)$$

El aparato es un sistema físico A que debe tener estados $|A_i\rangle$, correspondientes a algo como la posición de un índice sobre una escala de valores, en correspondencia biunívoca con los valores posibles s_i de la observable microscópica: o sea, si el aparato se encuentra inicialmente en un estado general $|A_0\rangle$ e interacciona con el sistema atómico que tenga exactamente el valor s_k de la observable S , por efecto de la interacción del proceso de medida el estado de A debe reducirse a $|A_k\rangle$. O sea

$$|A_0\rangle |s_k\rangle \text{ medida } |A_k\rangle |s_k\rangle \quad (4)$$

El problema surge cuando el sistema atómico, en lugar de encontrarse en un estado definido por un valor de la observable S , se encuentra en una superposición de estados (un paquete)

$$\sum_k c_k |s_k\rangle \quad (5)$$

En este caso el proceso de medida debe dar como resultado final uno de los posibles valores s_h con probabilidad $|c_h|^2$. Pero, siendo la ecuación de Schrödinger lineal, de la definición (4) sigue que

$$|A_0\rangle \sum_k c_k |s_k\rangle \text{ medida } \sum_k c_k |s_k\rangle |A_k\rangle \quad (6)$$

¡En esta expresión no se ha producido el colapso de la función de onda! En efecto sabemos de la (2), que es un caso particular, que *en el estado (6) del sistema Aparato+Sistema atómico, ¡no el uno ni el otro se encuentran en un estado cuántico definido!* Otra forma de verlo es recordar que sabemos que un sistema que se encuentra en un estado cuántico definido, aún si no sabemos cuál, y solo conocemos las probabilidades de $|c_k|^2$ con que se presenta cada estado, se representa a través de un operador densidad

$$\hat{P}_I = \sum_k |c_k|^2 |A_k\rangle |s_k\rangle \langle s_k| \langle A_k| \quad (7)$$

En cambio, si calculamos el operador densidad que corresponde a la situación física representada

por (6) (que es un estado puro para el sistema total $A + S$), obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{P}_{II} &= \sum_k |c_k|^2 |A_k\rangle |s_k\rangle \langle s_k| \langle A_k| + \sum_k \sum_{k'} c_k^* c_{k'} |A_k\rangle |s_k\rangle \langle s_{k'}| \langle A_{k'}| \\ &= \hat{P}_I + \sum_k \sum_{k'} c_k^* c_{k'} |A_k\rangle |s_k\rangle \langle s_{k'}| \langle A_{k'}| \end{aligned} \quad (8)$$

El primer término correspondería a la reducción del estado correspondiente al resultado de la medición: pero aparece el segundo "término de interferencia", que hace la diferencia, o sea significa que el colapso no se ha producido, en cuanto a los términos de interferencia estos son entre estados correspondientes a distintos valores propios de la observable microscópica^{xvi}. Queda claro que esto es consecuencia de que lo que se superpone linealmente son las amplitudes de probabilidad y no la probabilidad, y de que la evolución temporal determinada por la ecuación de Schrödinger es lineal: esta, como se ve, es la base de todos los problemas que estamos analizando.

En realidad el trato que hemos dado del aparato de medida es inadecuado. Este aparato suele ser un sistema microscópico y, como hemos discutido a propósito del "gato de Schrödinger", él debería describirse correctamente con una matriz densidad, en lugar de la expresión (4): pero sería fácil mostrar que tampoco en esta forma el problema se soluciona, y que la reducción del paquete no se realiza.

Von Neumann, en su famoso libro "Mathematical Foundations of Quantum Mechanics" de 1932, declara que hay dos formas completamente distintas de evolución temporal del estado de un sistema cuántico: una consiste en la evolución según la ecuación de Schrödinger, la otra es una evolución discontinua que, como hemos dicho, se conoce vulgarmente como "colapso de la función de onda" y que solo ocurre en el proceso de medida.

Hubo también interpretaciones subjetivistas, que han insistido más en el papel del observador, cuya toma de conciencia del resultado de la medida determina el "colapso"^{xvii}.

Por otro lado, se han desarrollado teorías en que hay un desacoplamiento entre el estado del aparato macroscópico y el estado del sistema microscópico, determinado por la interacción con el entorno. Tanto S como A están constantemente en contacto con características del entorno que normalmente se

^{xvi} Tal vez en la literatura se ha llamado a la (7) *mezcla propia*, y a la (8) *mezcla impropia*.

^{xvii} Para más detalles véase el volumen colectivo ya citado, *El Siglo de la Física*.

ignoran y cuya influencia, aun en el caso de que fueran pequeñas, podría explicar el colapso^{xviii}.

Las "variables ocultas"

Einstein pensaba poder completar la descripción de la mecánica cuántica con la introducción de "variables ocultas", que completarían la teoría cuántica y recuperarían una descripción determinista en el espacio y en el tiempo, de forma parecida al papel que los átomos juegan en la mecánica estadística.

La historia de las teorías de variables ocultas es muy larga y compleja: discutiremos aquí sólo los aspectos esenciales.

Von Neumann, en el cuarto capítulo del citado tratado de 1932, utilizando instrumentos formales, llegó a lo que es denominado el "teorema de Von Neumann", o sea a la conclusión de que "el presente sistema de la mecánica cuántica tendría que ser - desde un punto de vista objetivo- falso, para que fuera posible una descripción de los procesos elementales distinta de la estadística", o sea que "es lógicamente imposible completar el formalismo de la mecánica cuántica de forma que desemboque en una descripción determinista de los procesos físicos".

Sin embargo, más tarde se comprobó que la demostración de Von Neumann no eliminaba cualquier tipo de teoría de variables ocultas. Las contribuciones más importantes en este sentido las dieron David Bohm y John Bell.

En el año 1952 Bohm propuso un modo concreto de "completar" la mecánica cuántica en términos de variables ocultas, que se identificaban con las coordenadas de posición inicial de las partículas, y que pueden completar la descripción de los estados dada en términos de la función de onda, y desembocar en una evolución temporal determinista del sistema^{xix}. La teoría de Bohm predice lo mismo que puede predecir la mecánica cuántica, por lo que desde el punto de vista empírico, no es objetable. Lo que la distingue de la mecánica cuántica es la interpretación y algunos rasgos conceptuales acerca de los que existe una literatura bastante extensa: se han dado muchos argumentos a favor y en contra.

De todas formas, ella constituía una formulación que contradecía concretamente el teorema de Von Neumann.

En la década de los sesenta Bell dio algunas contribuciones fundamentales para aclarar el problema. En 1966 él logró construir un modelo de variables ocultas explícito para el problema de las dos partículas de espín $\frac{1}{2}$, que hemos discutido. Al mismo tiempo él aclaró que el teorema de Von Neumann se basaba sobre un postulado arbitrario, cuya validez era ya de por sí una peculiaridad de la mecánica cuántica.

La estructura no local de la mecánica cuántica

En 1964 Bell había obtenido otro resultado fundamental al demostrar que ninguna teoría *local* de variables ocultas podía reproducir todas las predicciones de la mecánica cuántica en experimentos de tipo EPR (como las dos partículas de espín $\frac{1}{2}$. *El acento se habría que situar en el adjetivo "local"*: se trata en concreto, en un marco realista, de excluir la posibilidad de que la predeterminación del resultado de una medida de un subsistema sea consecuencia de la propagación de una señal no física (es decir super-luminal) emitida por el otro. Bell hacía resaltar así el carácter *no local de la mecánica cuántica*. Bohm había logrado construir una teoría de variables ocultas *equivalente* a la mecánica cuántica acerca del porqué su teoría era *no local*.

Con este enfoque Bell lograba también por primera vez encontrar una diferencia experimental entre la mecánica cuántica y una teoría *local* de variables ocultas. Una teoría realista necesitaría que el valor $+\frac{1}{2}$ o $-\frac{1}{2}$ del espín de un subsistema a lo largo de una dirección cualquiera nazca, ya determinado, al salir la partícula de la fuente, y entonces dependa de si una variable oculta cae en uno u otro de los dos subdominios de variabilidad; lo mismo vale para el otro subsistema. El requisito de la *localidad* se expresa por la necesidad de que resultados de mediciones efectuadas en el primer subsistema no dependan de la segunda dirección (y viceversa). De ello se deduce una expresión explícita para el valor medio de los productos de los espines a lo largo de direcciones dadas. Bell demostraba así que existe

^{xviii} Véase por ejemplo una actualización reciente de este punto de vista en S. Haroche, "Entanglement, decoherence and the classical/quantum boundary", *Physics Today*, July 1998. En este trabajo se discuten los experimentos que se están llevando a cabo para detectar concretamente el proceso de decoplamiento de los dos subsistemas; además se está investigando en sistemas "mesoscópicos" (es decir al límite entre el microscópico y el macroscópico) para averiguar en qué escala de dimensión del aparato de medida empezará a actuar el proceso de decoplamiento.

^{xix} En términos más técnicos, Bohm descompone sencillamente la función de onda en dos partes, el módulo R y la fase S . La ecuación de Schrödinger da lugar a un sistema de dos ecuaciones para estas cantidades reales. La interpretación clásica es que R^2 es la probabilidad (como en la mecánica cuántica), y S es la fase y satisface una ecuación de Hamilton-Jacobi modificada. El gradiente de S multiplicado por $\hbar/2\pi$ puede interpretarse como el momento de la partícula, mv . Bohm demuestra entonces que esta partícula obedece a una ecuación del movimiento de tipo newtoniano, en la que la fuerza viene dada por el gradiente cambiado de signo del potencial V que aparece en la ecuación de Schrödinger, más un nuevo potencial, U , conocido como "potencial cuántico", multiplicado por $\hbar^2$. Si se conocen las *posiciones iniciales* de las partículas, que juegan el papel de *variables ocultas*, se tiene una evolución temporal causal.

una combinación de tres de estos valores medios, correspondientes a pares de direcciones *a* y *b*, *a* y *c* y *b* y *c*, que debe satisfacer una desigualdad que la mecánica cuántica viola: es el célebre *teorema de Bell*. Cabe subrayar el hecho que la diferencia entre una teoría local y la mecánica cuántica puede observarse sólo si se miden propiedades relativas a *correlaciones entre los dos subsistemas*: observaciones relativas a un solo subsistema no pueden discriminar entre las dos situaciones.

Bell entonces concluía que es posible construir teorías de variables (*no locales*) que reproducen los resultados habituales de la mecánica cuántica (refutación del teorema de Von Neumann), que se puede distinguir experimentalmente entre mecánica cuántica y teorías de variables ocultas *locales*, y (fundamental) que experimentos al respecto aún no se habían efectuado.

Varios experimentos han sido efectuados en las décadas de los setenta y de los ochenta, y han proporcionado, en su mayoría, resultados acordes con la mecánica cuántica (se han presentado dos excepciones: pero en uno de los casos, una repetición del experimento a cargo de otro grupo dio resultados acordes con la mecánica cuántica, en el otro caso los resultados no han sido publicados). Las reacciones han sido múltiples^{xx}. En general los heterodoxos continúan siendo heterodoxos: varios niegan el carácter conclusivo de los experimentos (algunos entre ellos se apuntan a las hipótesis adicionales que son siempre necesarias para someter el teorema de Bell a un control experimental, y demuestran que, si se prescinde de ellas, se pueden construir modelos realistas locales que expliquen todos los resultados experimentales). Pero la actitud ampliamente dominante es de considerar confirmada la validez de la mecánica cuántica.

CONCLUSIONES

Las características fundamentales de la mecánica cuántica a que parece tenemos que acostumbrarnos pueden considerarse entonces:

- la *falta de realismo*: la realidad de los elementos de realidad física nace con la observación;
- la *falta de localidad*: al interior de sistemas cuánticos de cualquier extensión, todo se puede concebir como si se propagaran "influencias" con velocidad infinita;
- la *falta de separabilidad*: dos sistemas físicos que han interactuado siguen formando un sistema

único y ni pueden concebirse como separados (que es otra forma de plantear la falta de localidad).

Varios opositores de la interpretación ortodoxa han formulado la *interpretación estadística*, según la cual un estado mecánico-cuántico proporciona una descripción de las propiedades estadísticas de un conjunto de sistemas preparados con el mismo definido procedimiento, y no necesariamente una descripción de un sistema individual. En realidad la interpretación de Copenhague no aclara si los objetos cuánticos individuales existen realmente o no. Por otra parte, los experimentos parecen demostrar que el realismo clásico, tal como habría gustado a Einstein y Schrödinger, tampoco es aceptable.

Me parece interesante señalar un último aspecto: ¿Cuál fue realmente la necesidad histórica de la revolución cuántica? Recordamos que la física clásica pareció fracasar en la comprensión del espectro de la radiación en la cavidad y en los calores específicos de los sólidos: este fracaso se basa en el teorema de equipartición de la energía. En este sentido hace falta señalar varios trabajos interesantes. En primer lugar, se puede criticar el uso del teorema de equipartición al campo de radiación: este tiene un número infinito de grados de libertad y la atribución a cada uno de ellos de una energía constante lleva inevitablemente a una energía infinita (como ocurre en la ley de Rayleigh y Jeans), lo que puede considerarse un absurdo (con el cuanto de energía se logra un valor finito porque la energía media de cada cuanto depende de la frecuencia de forma tal que compensa el número de modos normales creciente con $\sqrt{\nu}$). Sin embargo, el teorema de equipartición se demuestra en mecánica estadística para un número finito de grados de libertad: no es claro si su aplicación al campo de radiación es autoconsistente, y se podría pensar que la divergencia de la energía total sea un índice de que el teorema no es válido para el campo de radiación.

En efecto, ya en 1954 Fermi, Pasta y Ulam, sobre la base de cálculos numéricos, habían encontrado de forma inesperada que, entre los modos de oscilación de una cadena rectilínea de partículas acopladas por interacciones no lineales, *no se obtenía equipartición*. Investigaciones más recientes, a partir de los años setenta, confirman que el teorema de equipartición no queda demostrado y que hay puntos de plausibilidad para su *no* validez. Si es así, aún queda por averiguar lo que la mecánica clásica prevé efectivamente, de forma rigurosa, sobre tales problemas.

^{xx} Para más detalles véase nuevamente el citado libro colectivo, *El Siglo de la Física*.

OBTENCIÓN DEL EFECTO FOTOTÉRMICO EN MUESTRAS DE COLORANTES DE COMPOSICIÓN COMPLEJA

A Escobar, G. A. Pérez*, M. Cobas, P. J. Larrea, R. Miranda y D. Rodríguez
Centro de Desarrollo de Equipos e Instrumentos Científicos (CEDEIC), Cuba

*Centro de Investigaciones en Óptica (CIO), Aguascalientes, México

RESUMEN

Se empleó la Espectroscopia Fototérmica, variante colineal, para la medición de pequeñas absorciones en soluciones acuosas de colorantes textiles. Fue observada linealidad en la señal fototérmica, para el intervalo de concentraciones estudiado, y determinada la longitud de onda que absorbe el colorante utilizado para la obtención del efecto fototérmico. Se muestran los resultados de la calibración de la señal fototérmica con la concentración de colorante en la solución acuosa.

ABSTRACT

Collinear Photothermal Spectroscopy to measure small absorption of aqueous solutions of textile dyes, was employed. Good linearity at the analyzed concentration ranges was obtained. It was determined the peak of absorption of each used dye, in order to select the convenient laser wavelength for dye thermal excitation. Curves of calibration of photothermal signal vs. dye concentration are showed.

INTRODUCCIÓN

Es bien conocido que cuando se absorbe radiación electromagnética por un medio, parte de la energía de excitación se convierte en energía térmica. Esto ha servido para que en los últimos años se desarrollara el método de Espectroscopia Fototérmica. Sin embargo, son más conocidos ejemplos y aplicaciones, y más comprendidos aún los fundamentos teóricos de otras técnicas, como son las espectroscopias de emisión y absorción, y fluorescencia, entre otras, no siendo así para la fototérmica.

El concepto de deflexión de un haz de luz, inducido por el cambio del índice de refracción, no fue conocido en largo tiempo, y aún no hay sistematicidad en las publicaciones que explican los resultados experimentales. Por ello, se expone brevemente el modelo teórico [1] en que se fundamenta nuestro sistema experimental.

La absorción de un haz de excitación óptica (de bombeo) provoca un correspondiente cambio del índice de refracción en la región de calentamiento óptico. Esa variación del índice de refracción se puede sensar con un segundo haz (de prueba). Entonces, su detección se puede correlacionar con la absorción de la muestra y con sus características térmicas, lo que permite el empleo de este principio en una técnica de determinación de bajas concentraciones de sustancias, que no puedan ser detectadas por métodos convencionales.

El fenómeno mencionado se presenta en diferentes variantes. De acuerdo con el camino óptico de los haces de bombeo y de prueba, estaremos en presencia de: *deflexión fototérmica colineal*, cuando el gradiente del índice de refracción es creado en la misma dirección que se sensa; o *deflexión fototérmica transversal*, cuando el gradiente del índice de refracción es creado en una dirección y sentido en dirección perpendicular. También los haces de prueba y de bombeo pueden formar cierto ángulo entre ellos.

Este método ha sido aplicado dada su alta sensibilidad en mediciones de pequeñas absorciones en películas delgadas, sólidos, líquidos y gases. También han sido demostradas sus potencialidades en microscopía de imágenes y barrido. En nuestro caso se obtuvo que la mayor sensibilidad se alcanza para la variante colineal [1], por lo que fue la aplicada en la determinación de bajas concentraciones en muestras líquidas de diferentes tipos de colorantes.

TEORÍA

El tratamiento teórico de este tipo de técnica ha estado sujeto, en la mayoría de los casos, a la configuración experimental desarrollada por cada autor. Por tanto, encontramos gran cantidad de soluciones teóricas específicas, no generales, que estudian las desviaciones de los haces debido al fenómeno de calentamiento en la muestra [2-4].

Cálculos o desarrollos generales para líquidos se hallan en el artículo de Jackson et al. [5], así como

en la monografía de Vargas y Miranda [6], y la de Gordon et al. [7]. En los artículos de Rosencwaig y Gersho [8], y de Murphy y Aamodt. [9], se observan fundamentalmente desarrollos para muestras sólidas. Además, para gases con flujos de alta y baja velocidad nos podemos remitir a Sell [10].

La absorción del haz láser de excitación (de bombeo) por parte de la muestra, produce un cambio en el índice de refracción en la zona ópticamente calentada, es decir, un gradiente del índice de refracción en la región perpendicular a la dirección de propagación del haz de excitación.

Al sensar la zona del gradiente del índice de refracción con un segundo haz de luz (de prueba), éste sufrirá una deflexión que está relacionada con la absorción óptica de la muestra, así como con otros parámetros.

Desde el punto de vista macroscópico puede suponerse que la zona del gradiente del índice de refracción actúa como una lente interpuesta en el camino del haz de prueba, haciendo que éste se desenfoque, estando en presencia del fenómeno de *lente térmica*; o que se deflexe en dependencia de la zona del gradiente que atraviese, y así estamos en presencia del fenómeno de *deflexión fototérmica*. En ambos casos, en el camino o eje óptico original del haz de prueba se obtendrá un cambio de intensidad del mismo. Además, en el caso de la deflexión fototérmica podrá medirse el ángulo de deflexión del haz de prueba.

Como fue señalado antes, se tienen dos variantes del fenómeno fototérmico:

-Colineal o con cierto ángulo: Cuando el gradiente del índice de refracción es creado y sentido en una misma dirección, que puede ser dentro de la muestra (Fig. 1, a y b).

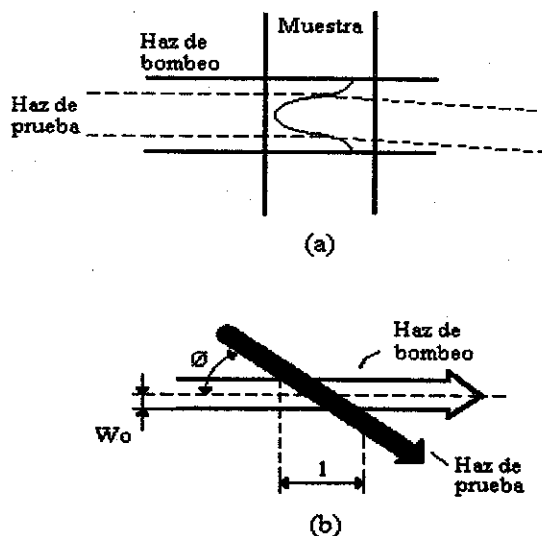


Fig. 1 (a) Deflexión fototérmica colineal.
(b) Formando ángulo pequeño

-Transversal: Cuando el gradiente del índice de refracción es sentido en dirección perpendicular a su origen, que puede ser en la capa adyacente a la muestra (Fig. 2).

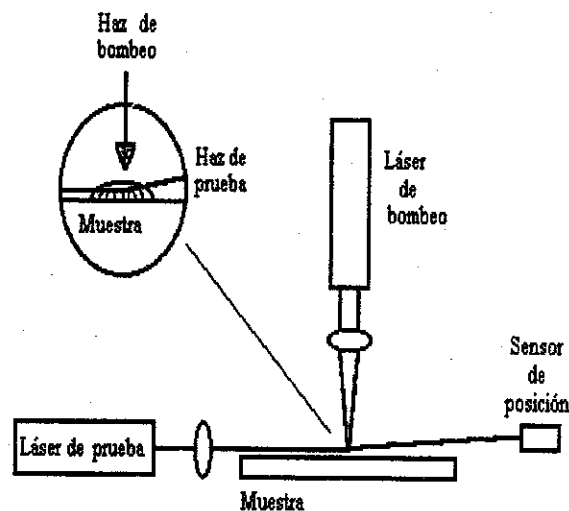


Fig. 2 Deflexión fototérmica transversal.

Esto permite estudiar, además de muestras transparentes, muestras opacas y materiales con pobre calidad óptica.

Cualesquiera sean las características experimentales que condicionen la teoría, siempre se trata de determinar la deflexión que sufre el haz de prueba o su cambio de intensidad en el campo lejano, ya que esa magnitud es proporcional a la concentración de la sustancia que absorbe al haz de excitación, o a la cantidad de defectos estructurales, o a la movilidad de los portadores, etc., en dependencia del caso que se estudie.

Este asunto puede dividirse en dos partes:

Primero, encontrar la distribución de temperaturas en la muestra, resolviendo la ecuación parabólica de conducción del calor en cada región de interés, utilizando las condiciones de frontera adecuadas (Fig. 3).

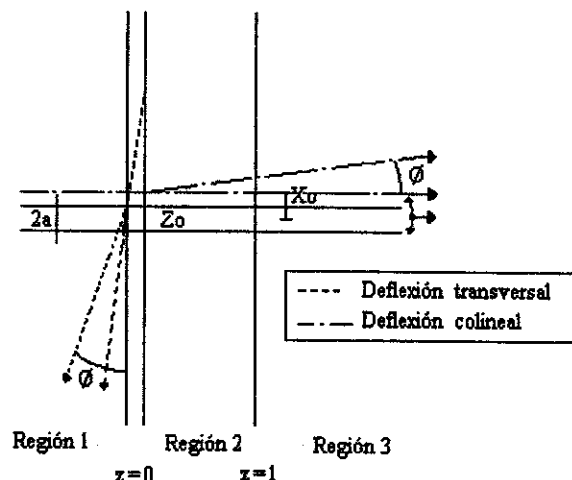


Fig. 3 Condiciones de frontera.

Segundo, debe calcularse el efecto de la distribución de temperaturas sobre el haz de prueba, es decir, calcular su ángulo de deflexión partiendo de que el índice de refracción es, en general, una función de la temperatura, la presión y la longitud de onda del láser.

Generalmente, puede despreciarse el aporte que sobre la deflexión del haz de prueba realizan las ondas acústicas que se forman en el medio calentado [5], pues sólo tendrán importancia experimental a muy altas frecuencias de iluminación de las muestras y alta potencia pico del haz de bombeo. Ambas cuestiones provocan la desaparición de la linealidad entre la señal fototérmica y las características termoópticas de la muestra, y que el desplazamiento del haz de prueba con respecto a su dirección inicial, al atravesar la zona calentada, sea considerablemente grande.

Así, se debe resolver un sistema inhomogéneo de ecuaciones en derivadas parciales del tipo parabólico en la zona de calentamiento (Fig. 3, región 2), y homogéneo en el resto de las zonas (regiones 1 y 3):

$$\nabla^2 T(r,t) - \frac{1}{D} \frac{\partial T}{\partial t}(r,t) = -\frac{Q}{K}(r,t) \quad (1)$$

$$\nabla^2 T(r,t) - \frac{1}{D} \frac{\partial T}{\partial t}(r,t) = 0 \quad (2)$$

donde: K es la conductividad térmica del medio, D = $K/\rho C_p$ la difusividad térmica, ρ la densidad, C_p la capacidad calorífica a presión constante, T la temperatura, y Q(r,t) el calor depositado por unidad de volumen, oscilando a la frecuencia ω sobre el medio absorbente.

Q representa la fuente de radiación (energía), teniendo en cuenta su geometría y sus dependencias temporal y espacial.

Usualmente se realizan simplificaciones [2] o aproximaciones que facilitan los cálculos teóricos, tales como asumir que el haz láser de calentamiento es Gaussiano con TEM₀₀, y cuyo radio ω_0 es constante en todo el trayecto dentro de la muestra.

En la mayoría de los casos se asume haz Gaussiano, TEM₀₀; pero se considera que el haz dentro de la muestra converge en un foco y después diverge, es decir, pasa previamente por una lente convergente que hace puntual al haz de bombeo dentro de la muestra. Eso permite sensar regiones muy pequeñas.

También se acepta por la generalidad de los autores el hecho de considerar que la única forma de transferencia de calor en la muestra es por

conducción. De esa manera, la distribución de la temperatura dentro de la muestra es función de la distancia radial desde el centro del haz y, naturalmente, del tiempo a partir del cual comienza la radiación a calentar la muestra. Esto simplifica considerablemente la operación matemática.

Nuestro análisis se basó en los cálculos realizados, para condiciones experimentales predeterminadas y comprobadas [1], lo que permitió concluir que la variante en la que se obtuvo mayor señal era la colineal, con la cual se desarrolló entonces la parte experimental del presente trabajo.

SECCIÓN EXPERIMENTAL

El esquema de la instalación experimental se muestra en la Fig. 4. El sistema fue construido usando dos variantes: excitando y sensando con láser de He-Ne (A); y excitando con láser de Ar y sensando con He-Ne (B).

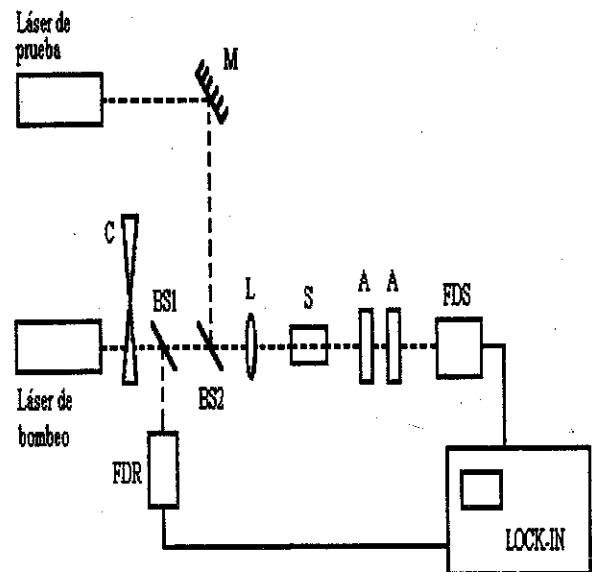


Fig.4 Instalación experimental de deflexión fototérmica colineal. C: chopper, M: espejo, BS1, BS2: divisores de haces, FDR: fotodiodo de señal de referencia, L: lente de enfoque, S: muestra, AA: analizadores (prismas de Glan Thompson), FDS: fotodiodo de señal analítica

En el caso (A) se usaron láseres de He-Ne de 8,05 mW de potencia para excitación y 0,18 mW para sensado, respectivamente. El haz de bombeo fue modulado en una onda cuadrada, simétrica, con un chopper mecánico Oriel. Aquí se utilizó la referencia del chopper. Para eliminar la señal de bombeo sobre el fotodetector se usaron polarizadores tipo Glan Thompson (Melles Griot, modelo 75095), y para disminuir interferencias externas a la radiación de prueba se utilizó un pinhole de aproximadamente 1 mm de diámetro. El haz de bombeo fue enfocado con una lente de 10 cm de distancia focal de manera que su cuello quedara en el centro de la muestra,

colocada en una cubeta de cuarzo de 1 cm de lado. El detector utilizado fue un fotodiodo de Si (Melles Griot C1116).

La medición absoluta de la magnitud de la señal fototérmica implica conocer previamente el coeficiente de absorción de la sustancia investigada, así como sus parámetros térmicos. Por consiguiente, en la práctica analítica es usual el empleo de curvas de calibración con muestras patrones, cuyos parámetros a investigar son conocidos a priori. Este es el modo usado cuando se quiere determinar la concentración. Entonces, la magnitud de la señal se mide experimentalmente en la instalación de trabajo.

Para calibrar el método descrito fueron usadas muestras patrones de I_2 en CCl_4 de concentraciones conocidas. En este caso se excitó y sensó con láseres de He-Ne. Los resultados, para la frecuencia de bombeo de 4 Hz, se muestran en la Fig. 5. Se observa linealidad en la respuesta del método, lo que permite el cálculo por interpolación de concentraciones desconocidas.

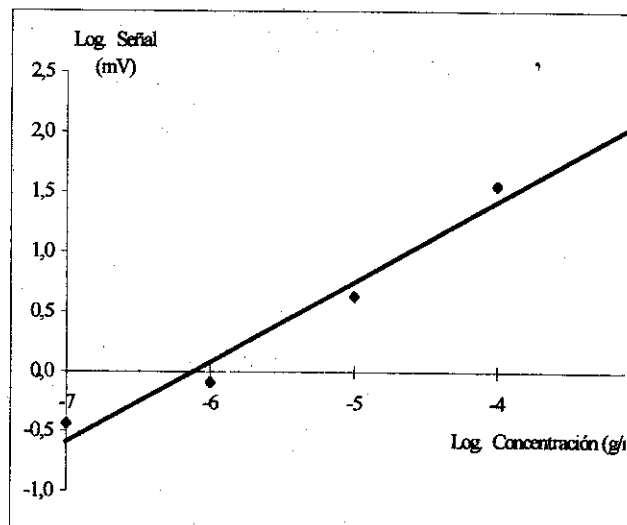


Fig. 5 Calibración de patrones de I_2 en CCl_4 .

Considerando la instalación calibrada y lista para su explotación, fueron obtenidas curvas de calibración para muestras de colorantes utilizados en

el teñido de textiles, obteniéndose que fueron sensibles a esta técnica el Azul Maxilón para el caso del He-Ne, y el Rosa B Maxilón para el caso del Ar, cuya absorción máxima respectiva corresponde a la longitud de onda del láser de excitación. Las Figs. 6 y 7 muestran los espectros de absorción de estos colorantes.

En el caso (B) la longitud de onda del láser de Ar fue 500 nm y 170 mW la potencia de trabajo; la longitud de onda del He-Ne fue 632,8 nm y la potencia 5 mW.

En ambos casos se realizó un estudio de la frecuencia de bombeo para establecer el valor más ventajoso a partir del criterio de máxima relación señal/ruido. Las Figs. 8 y 9 muestran esas dependencias. De ellas se obtienen que las frecuencias de bombeo adecuadas para las muestras de Azul Maxilón y Rosa B Maxilón son de 6-7 Hz y de 8-9 Hz, respectivamente.

Las Figs. 10 y 11 muestran las curvas de calibración para el Azul Maxilón y el Rosa B Maxilón. Su linealidad permite recomendar el uso de este método para el cálculo de bajas concentraciones o trazas de colorantes en residuos industriales.

CONCLUSIONES

Se logró corroborar la factibilidad y versatilidad de la técnica de Espectroscopia Fototérmica, variante colineal, para la medición de pequeñas absorciones en muestras líquidas, lo cual permitió construir curvas de calibración por concentración para diferentes muestras de colorantes textiles.

Los resultados de la calibración de la señal fototérmica con la concentración permiten predecir que esta técnica no destructiva, en la que además se consumen pocas cantidades de sustancias (≈ 1 ml de muestra es suficiente para cada prueba), puede constituir una vía adecuada para estudios de trazas en soluciones coloreadas donde el método colorimétrico no tenga sensibilidad para la detección.

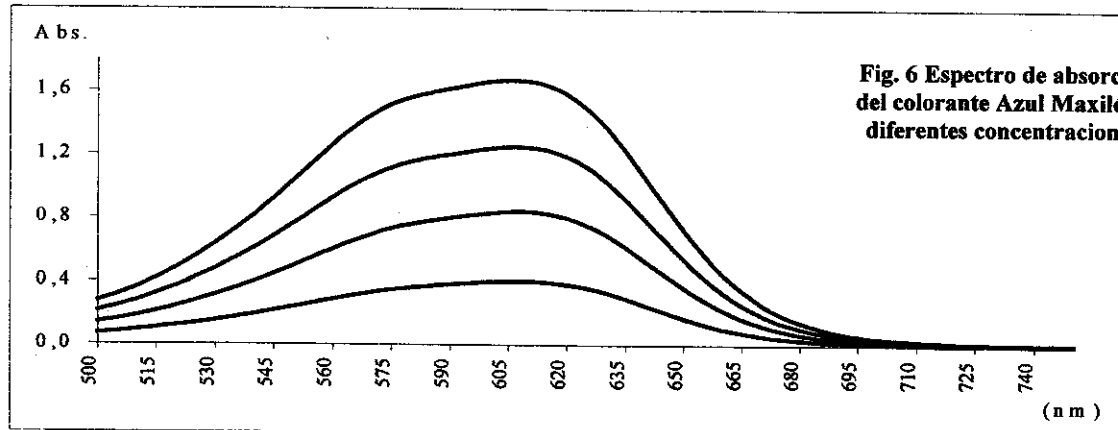


Fig. 6 Espectro de absorción del colorante Azul Maxilón a diferentes concentraciones.

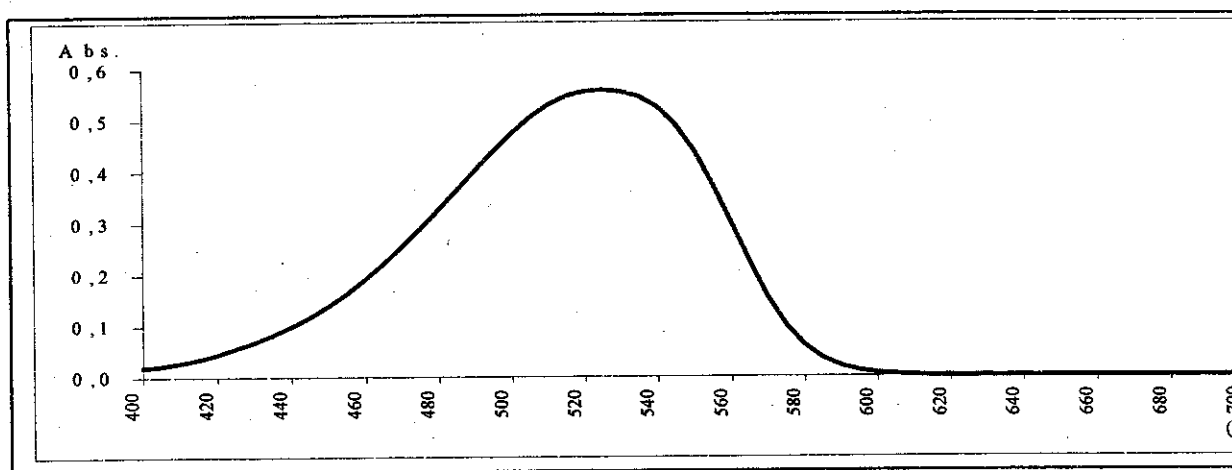


Fig. 7 Espectro de absorción del colorante Rosa B Maxilón (8×10^{-6} g/ml).

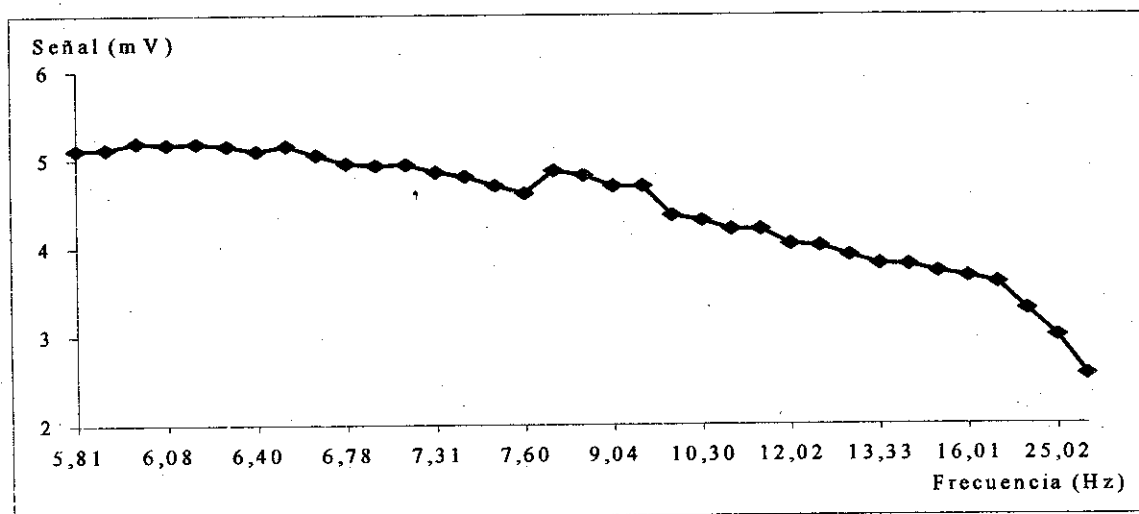


Fig. 8 Señal fototérmica vs. frecuencia de bombeo para el Azul Maxilón.

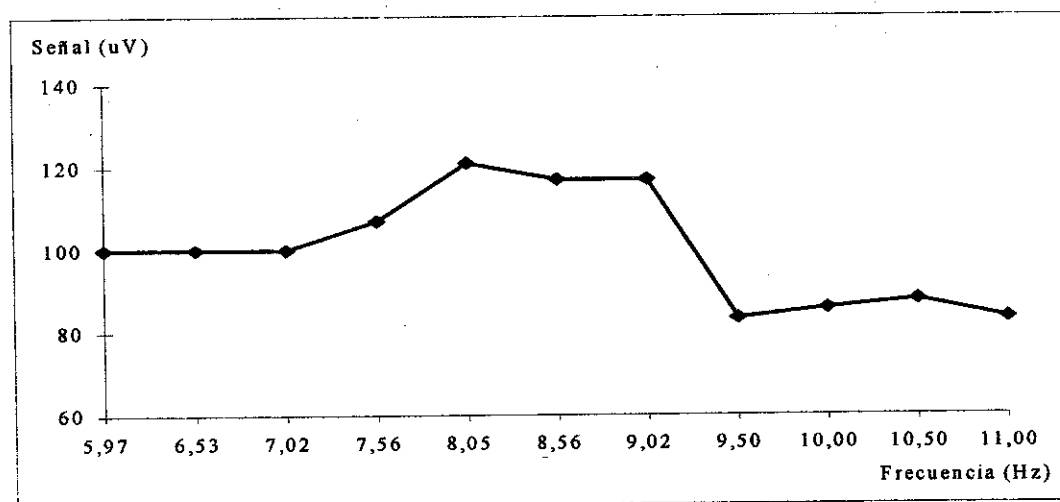


Fig. 9 Señal fototérmica vs. frecuencia de bombeo para el Rosa B Maxilón

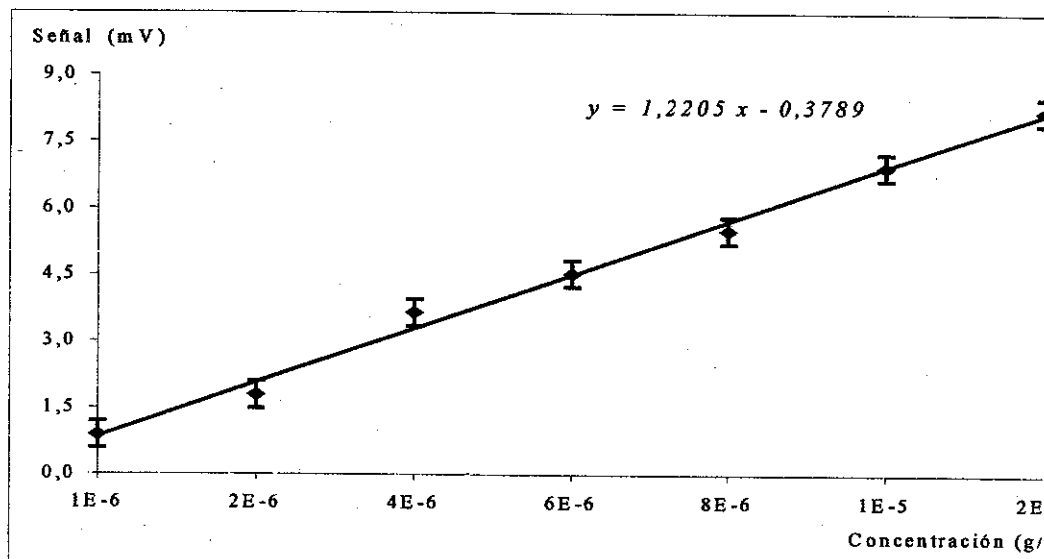


Fig. 10 Curva de calibración de la señal promedio del Azul Maxilón.

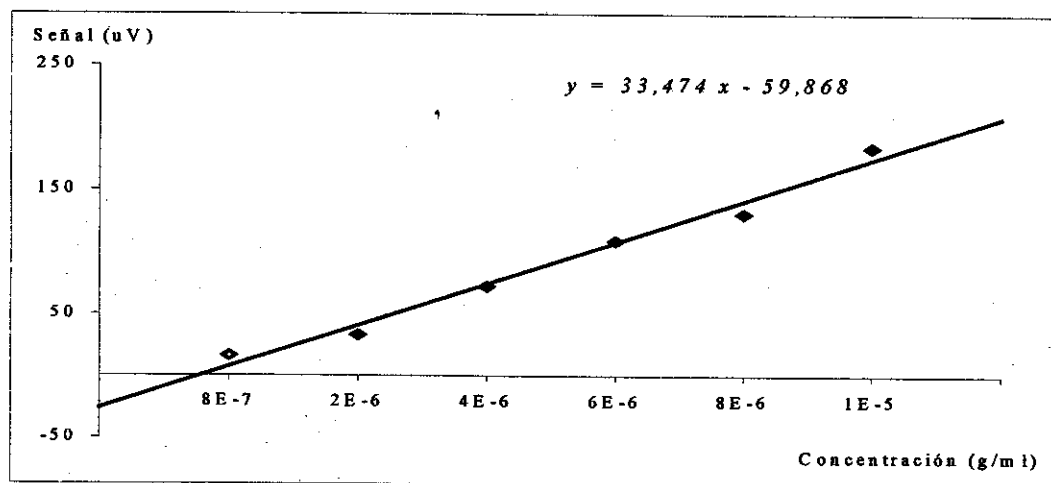


Fig. 11 Curva de calibración del Rosa B Maxilón.

REFERENCIAS

- [1] Escobar, A., A., Korenchenko P Larrea., L. García, y Cobas, M. (1993): *Método de espectroscopia de deflexión fototérmica para la determinación de bajas concentraciones en sustancias puras*. Rev. Ciencias Téc., Fís. y Mat. No. 13, 66.
- [2] Dovichi, N.J., T.G Nolan., and, W.A. Weimer (1984): *Theory for laser-induced photothermal refraction*. Anal. Chem. **56**, 1700.
- [3] McDonald, F.A. and Wetsel, G.C. (1978): J. Appl. Phys. **49**, 2313.
- [4] Mandalis, A. and S.S. Royce, (1979): J. Appl. Phys. **50**, 4331.
- [5] Jackson, W.B., N.M., Amer, , A.C Boccara., and, D. Fournier (1981): *Photothermal deflection spectroscopy and detection*. Appl. Opt. **20**, 1333.
- [6] Vargas, H. and L.C.M. Miranda, (1988): *Photoacoustic and related photothermal techniques*. Physics Reports (Review Section of Phys. Lett.) **161**, 44.

- [7] Gordon, J.P., R.C.C., Leite, R.S., Moore, Porto, S.P.S., and J.R. Whinnery, (1965): *Long transient effects in lasers with in-serted liquid samples*. J. Appl. Phys. **36**, 3.
- [8] Rosencwaig, A. and A. Gersho, (1976): *Theory of the photoacoustic effect with solids*. J. Appl. Phys. **47**, 64.
- [9] Murphy, J.C. and L.C. Aamodt, (1980): J. Appl. Phys. **51**, 4580.
- [10] Sell, J.A. (1984): *Quantitative photo-thermal deflection spectroscopy in a flowing stream of gas*. Appl. Opt. **23**, 1586.

INFLUENCIA EN EL APRENDIZAJE DE LOS ALUMNOS USANDO UN LABORATORIO VIRTUAL DE FÍSICA

G. Ortega-Zarzosa, H. Medellín-Anaya y J.R. Martínez. Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma de San Luis Potosí 78000 San Luis Potosí, S.L.P., México

RESUMEN

Se analiza la influencia que sobre el aprendizaje de los alumnos produce la utilización de un laboratorio asistido por computadora como herramienta de un indudable interés didáctico en el campo de las ciencias experimentales. El laboratorio asistido por computadora que se utiliza en este trabajo fue desarrollado en la Facultad de Ciencias de la UASLP y, en su primera etapa, utiliza 6 simuladores en ambiente windows que tratan los temas de vectores, cinemática, caída libre, tiro parabólico, plano inclinado y riel de aire. A este sistema de simuladores, diseñado para contrastarse con experimentos reales, le denominamos Laboratorio Virtual de Física. Cada uno de estos simuladores permite desarrollar una práctica virtual acompañada de su respectiva práctica real. El sistema se fundamenta en la idea de aprender explorando, en el proceso de aprendizaje.

ABSTRACT

The influence on the knowledge of the student when a physics virtual lab is used was analysed in a didactic view. The virtual lab was developed in the FC-UASLP and include 6 simulated experiments at windows ambient. The simulated systems were designed to be used with a real experiment, in order to developed a real practice and a virtual practice in each interactive activity.

INTRODUCCIÓN

La dificultad que presenta la enseñanza de la física por sus formalismos y el uso de matemáticas, en la mayoría de nuestros alumnos, constituye un obstáculo en el proceso enseñanza-aprendizaje, aunado a la dificultad para interpretar gráficas y poder relacionar sus datos con los hechos reales, dificultad para realizar una adecuada toma de datos, entre otros. En años recientes la utilización de la computadora en procesos de enseñanza-aprendizaje ha cobrado mucho interés y se han realizado una gran cantidad de simuladores de experimentos y fenómenos físicos propiciando que a través de una computadora se pueda disponer de un laboratorio y poder efectuar prácticas experimentales en forma virtual. La informática puede concordar con las teorías sobre aprendizaje significativo, tanto porque por su propio mecanismo organiza conceptos nuevos en relación con los adquiridos anteriormente, como por la consideración que desde el teclado se hace del propio alumno como ente activo y responsable de la manipulación de la información [1]. Las posibilidades de simulación interactiva que ofrecen las computadoras abren un amplio abanico de posibilidades didácticas. Muchos de los fenómenos físicos escapan a la posibilidad de constatación experimental, ya que es imposible llevarlos a cabo por sus limitaciones técnicas. Sin embargo, la computadora puede simular el aspecto experimental del fenómeno, pudiendo los alumnos variar parámetros de la

simulación, analizar resultados y discutir conclusiones [2].

El escenario epistemológico en el que se construye un conocimiento es de especial importancia para lograr un aprendizaje significativo. En el caso de los alumnos que ingresan a licenciatura, al menos en el caso de San Luis Potosí, carecen de una apropiada enseñanza experimental en física, por lo que su familiarización tanto con la comprensión de conceptos de fenómenos físicos, por un lado, como los procesos técnicos de análisis experimental, por el otro, presentan serias deficiencias [3]. Estos hechos obstruyen la enseñanza de la física en los cursos de introducción en nuestra licenciatura. Con el fin de interrelacionar diversos escenarios se ha diseñado un sistema que involucra el uso de la computadora con simuladores que organizan una práctica virtual combinado con el uso de un laboratorio real. De este modo se optimizan las ventajas de ambos sistemas y le dan forma a las experiencias que posteriormente son utilizadas como ideas previas para lograr un cambio conceptual.

El laboratorio asistido por computadora que se utiliza en este trabajo fue desarrollado en la Facultad de Ciencias y utiliza, en esta primera etapa, 6 simuladores en ambiente windows que tratan los temas de vectores, cinemática, caída libre, tiro parabólico, plano inclinado y riel de aire. Este sistema de simuladores está diseñado para

constatarse con experimentos reales, al cual le denominamos Laboratorio Virtual de Física (LVF). Cada uno de estos simuladores permite desarrollar una práctica virtual acompañada de su respectiva práctica real. El sistema se fundamenta en la idea de aprender explorando, en el proceso de aprendizaje. El uso de los simuladores predispone al estudiante al experimento obteniendo mejores resultados en la construcción de los conceptos y sobre todo en el interés que despierta en estudiantes de los primeros cursos de física en carreras de licenciatura. Las ventajas que ofrece la incorporación de este tipo de programas además de las antes mencionadas son: El alumno puede cambiar una serie de parámetros y realizar su simulación en tiempos pequeños. Los alumnos tienen acceso y manejo de software como hoja de cálculo y procesador de palabras, que les será útil en su formación académica. El alumno puede manipular datos, construir gráficos, interpretarlos y discutir conclusiones.

INTERRELACIÓN DE ESCENARIOS

Tomando en cuenta la diferenciación de escenarios epistemológicos, en lo que se refiere a la construcción de conocimientos, en conocimiento cotidiano, escolar y científico [4], tratamos de construir un sistema interactivo que tiene la característica de ordenar las ideas que sobre un concepto tiene el alumno a fin de enriquecer sus experiencias cotidianas y en base a este enriquecimiento, pueda acceder a la construcción de conocimiento escolar. El factor que potencia la interrelación de estos escenarios lo constituye la ambivalencia de laboratorio virtual y laboratorio real. De esta manera se diseñan actividades que requieren el continuo paso del laboratorio virtual al laboratorio real. Esta situación nos permite manipular el escenario epistemológico de trabajo del alumno. Esta manipulación de escenarios está planteada desde la perspectiva del constructivismo diferencial, que a diferencia del unitario, los escenarios se diferencian, no sólo por aspectos de contenido, sino sobre todo por aspectos epistemológicos de fondo [5]. Así el cambio conceptual no se da como una simple sustitución del conocimiento cotidiano por el científico, aunque el primero sigue siendo un anclaje conceptual importante para la construcción del conocimiento escolar [6].

Los aspectos cognoscitivos necesarios para determinados conceptos de la física, requieren tomar en cuenta las ideas previas de los estudiantes, las cuales están regidas, en parte, por el conocimiento adquirido a través de la observación y la experimentación [7]. Para facilitar la construcción de conceptos físicos es necesario familiarizar al estudiante con fenómenos físicos. Esta familiarización requiere que el estudiante observe al menos el fenómeno. A partir de la

observación el alumno enriquece su conocimiento inicial. Cuando los alumnos adquieren el conocimiento inicial o cotidiano, la meta principal de la interacción maestro-alumno es reconstruirlo de tal manera que se acerque, tanto como sea posible, al conocimiento científico. La situación en la enseñanza escolarizada es crítica en el sentido de que si bien el estudiante tiene un conocimiento inicial, basado en la mayoría de las veces en el sentido común, éste no necesariamente implica la observación previa de fenómenos físicos y al desecharse la realización de demostraciones o experimentos físicos en el salón de clase se le exige al estudiante "imagine" toda una serie de situaciones físicas, por lo que se requiere emplear un modelo mental para representar la realidad lo cual en la mayoría de las veces conduce a que el alumno no lo pueda descifrar por que no tiene esquemas mentales que le permitan interpretarlo; con esto, la comunicación educativa es cortada y el proceso del aprendizaje estudiantil fracasa [3]. En lugar de desarrollar primero las experiencias directas y las ideas sensibles acerca de los fenómenos físicos y después introducir palabras y definiciones técnicas, el alumno está expuesto, desde el principio, a ideas abstractas que no es capaz de comprender y lo único que puede hacer es rechazar la física, y en el mejor de los casos, construir un sentido equivocado o memorizar y repetir palabras sin sentido para el examen [8]. En este punto las dificultades para armar un arreglo experimental que permita acceder a esta observación es facilitada por la simulación en computadora.

De esta manera el desarrollo de un sistema interactivo a manera de laboratorio virtual permite familiarizar al estudiante, a través de la simulación y la experimentación virtual y real con fenómenos y principios físicos, con los cuales, en teoría, deberían ya estar familiarizados y, que en la práctica no se da. Las actividades de nuestro sistema virtual están diseñadas para manipular el escenario epistemológico en que se sitúa el alumno.

El sistema ha sido probado en los cursos regulares de física en los primeros semestres de licenciatura, como material auxiliar; de igual forma ha sido probado con estudiantes de otros niveles educativos previos a la licenciatura, fuera de un curso formal como actividad extraescolar. En la siguiente sección describimos en forma general el LVF plantándonos en un escenario escolar.

LABORATORIO VIRTUAL DE FÍSICA

A fin de poder manipular el escenario epistemológico, se desarrollo el concepto de LVF, el cual consiste en la utilización de la enseñanza asistida por computadora (EAC) y la estructura de un laboratorio de experimentación real. Las actividades del LVF interrelacionan ambos sistemas.

Mientras que la EAC es un sistema basado en la adquisición de conocimientos, el LVF busca desarrollar habilidades intelectuales y estrategias cognoscitivas en el alumno. La EAC asume una forma de aprendizaje magistral y deductivo a través de sistema de preguntas-respuestas, mientras que el LVF, sosteniendo un ambiente de laboratorio, asume una forma de aprendizaje heurístico e inductivo.

En cuanto a las computadoras, las capacidades gráficas, de animación y de cálculo permiten simular y visualizar los fenómenos, de forma que la computadora oculta el modelo matemático, para introducir con posterioridad, si a sí se desea, el formalismo matemático. Existen varias formas de uso de las simulaciones en la aproximación a la construcción de los conceptos por parte del estudiante, nosotros utilizamos simulaciones con gráficos animados interactivos que permiten mostrar la repercusión que tiene la modificación de los parámetros que intervienen en el fenómeno bajo estudio, figura 1.

Por otro lado, en las prácticas tradicionales, la mayor parte del tiempo disponible se consume en ir tomando datos más o menos exactos, agruparlos en tablas, tratarlos gráficamente, etc. Si dicha actividad se planifica "auxiliada" por la computadora, éste organizará y tabulará automáticamente los datos en una hoja de cálculo, y realizará las representaciones gráficas oportunas. El alumno podrá, según lo necesite, cambiar las representaciones, invertir las variables, recuperar gráficas de experiencias anteriores, compararlas, etc. Por consiguiente, además del importante aspecto motivador que conlleva el uso de esta tecnología, los alumnos

estarían llevando a cabo una auténtica tarea de investigación.

Debido a la evolución de la ciencia y la tecnología las tareas cotidianas se han facilitado con la automatización y el uso de las computadoras. Una parte esencial de las computadoras son los programas. Una aplicación de las computadoras y programas, que tiene mucho auge es la de auxiliar en la labor docente sobre todo en la enseñanza de la ciencia. Por esta razón, surgió la inquietud de desarrollar programas de simulación para la enseñanza de la física en la Facultad de Ciencias. A la fecha se han implantado algunos en el área de mecánica básica. Los programas fueron desarrollados en una plataforma con las siguientes características: procesador Pentium MMX a 200 MHz, con 32 MB de Ram, monitor SVGA, tarjeta de sonido compatible con Sound Blaster. Cada programa ocupa de 250 a 400 KB no siendo, por tanto, necesario mucho espacio en disco. Se recomienda tener Windows 95 configurado con fuentes grandes para una mejor resolución en los simuladores. Para instalar los programas en el disco duro, basta copiarlos en alguna carpeta que sea designada por el usuario. Los simuladores fueron implantados en uno de los lenguajes más actualizados en código Pascal usados para el diseño de aplicaciones con objetos, el Delphi32 [9].

La parte del LVF desarrollada hasta el momento consta de seis simuladores que se pueden localizar en la carpeta del usuario, en donde cada uno de los programas puede ser accesado de forma indistinta. El conjunto de programas indica una serie de observaciones y actividades que el estudiante debe de realizar en la computadora, para seleccionar y

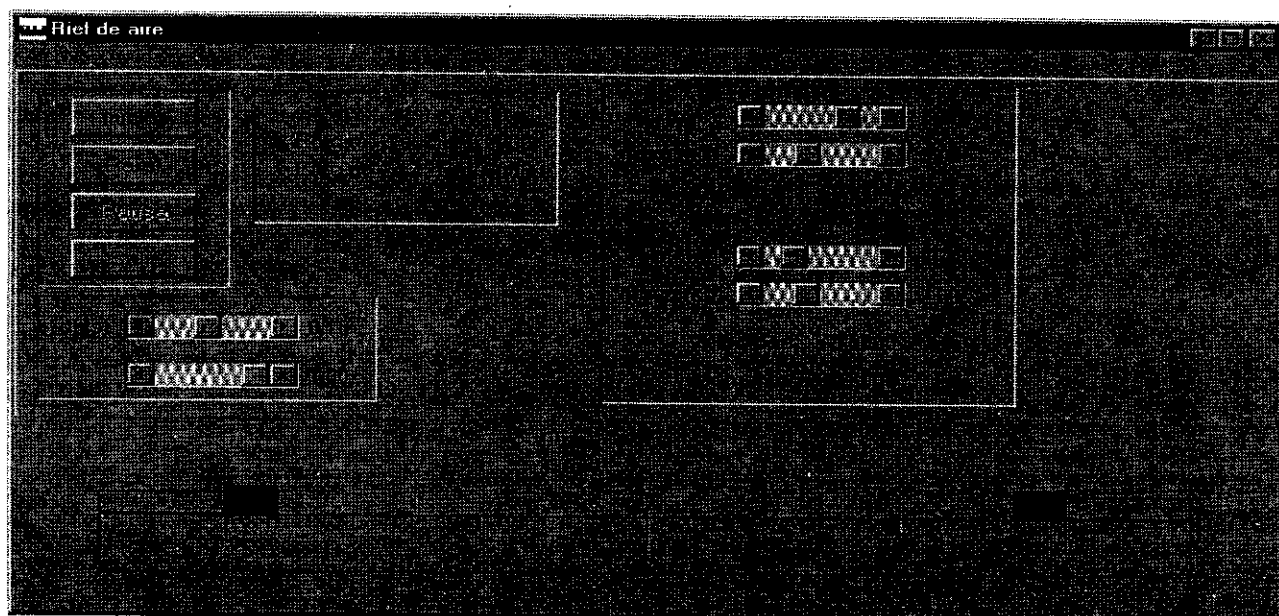


Fig 1. Esquema gráfico animado interactivo para el experimento que involucra el uso del riel de aire.

controlar las variables involucradas en un experimento. El estudiante a través de la computadora obtiene tablas y gráficas manejando los distintos parámetros involucrados, mismas que analiza y de su estudio concluye el comportamiento del sistema. La práctica contiene una serie de preguntas que, usando sus conclusiones, el estudiante debe responder en el mismo programa y, dado el caso, volver a repetir o realizar cambios en el tratamiento de las variables hasta tener un entendimiento adecuado para responder la totalidad de las preguntas. A continuación, con los resultados de su práctica virtual debe montar el experimento real, usando los resultados virtuales para el control de las variables y realizar su práctica real de acuerdo a la serie de preguntas establecidas; en todo este proceso la computadora asiste el desarrollo de la práctica global, de tal forma que el arreglo experimental se deriva de los resultados y observaciones realizadas en la práctica virtual.

Los simuladores desarrollados ofrecen la posibilidad a los alumnos de conseguir resultados de manera casi inmediata, puesto que sólo basta con pausar el programa para obtenerlos, registrarlos o para manejarlos de la manera que más les convengan, por ejemplo; realizar gráficas y/o presentarlos por medio de listados para obtener una apreciación más amplia de cada fenómeno físico y con ello un discernimiento de los mismos.

CONCLUSIONES

La parte del LVF desarrollado hasta el momento, pretende dar un conjunto de herramientas que puedan ser usadas para la construcción de conocimiento cotidiano y/o escolar, de tal forma que se pueda dar un mayor entendimiento a los conceptos que forman la mecánica básica. En esta primera parte del LVF se tratan de cubrir algunos de los aspectos más importantes.

La aplicación de los programas de simulación en los cursos de Física I arrojan resultados favorables, puesto que los estudiantes encuentran en ellos una herramienta de apoyo, al poder verificar y/o incrementar sus conocimientos básicos o, en su

defecto aprender con ellos. El sistema les permite observar paso a paso el progreso de la simulación, siendo capaces de determinar como se dan dichos sucesos. Estudiando el comportamiento de forma gradual y al realizar los experimentos, los lleva a una mejor comprensión de la teoría, ya que los cálculos se elaboran con eficacia y rapidez de manera interactiva. Esto les concede integrarse a la simulación de tal forma que las sesiones sean menos pesadas y más comprensibles.

El uso del LVF ha mostrado ser de gran ayuda. La experiencia que se llevó a cabo en los cursos de Física I para repetidores (cursos que son asignados a estudiantes que lo reprobaron en una ocasión), significó una mejora del aprovechamiento de los alumnos. El rendimiento fue muy superior al de su primer curso. Además, con la aplicación de algunos elementos del "Office" (Word y Excel) los alumnos adquirieron un entrenamiento muy valioso.

Mediante la simulación los alumnos pudieron darse cuenta de fenómenos simples pero difíciles de visualizar, como el hecho de que un proyectil mantiene su velocidad horizontal constante o de cómo se conserva la cantidad de movimiento en choques elásticos e inelásticos, lo que es difícil de visualizar en un experimento real.

Se puede decir que la experimentación de la física también se puede realizar de manera dinámica y atractiva para los usuarios. De tal forma que se pueda ver la enseñanza y/o el aprendizaje de los conocimientos de forma sencilla, así como, la aplicación de la teoría que lo fundamenta. Los programas no solo sirven de apoyo en el aprendizaje de la física sino que también pueden ser el punto de partida para una educación (en general) virtual y activa que nos permita intervenir en la aplicación de las ciencias. Con este sistema, se logra un radical cambio de actitud en el estudiante; al realizar la parte correspondiente a la práctica real, la realiza no solo con el objeto de comprobar sino con el afán de investigar el comportamiento del sistema físico, lo que conduce a una posición heurística por parte del alumno.

REFERENCIAS

- Landazabal, M.C.P., J.M. Moreno y J. García-Gallo, (1989): *Enseñanza de las Ciencias*, No. extra, III Congreso Internacional, 238
- Pedrajas-Rodríguez C. y J. Velasco-Toscano, (1997): *Enseñanza de las Ciencias*, No. extra, V Congreso Internacional, 261
- J.R. Martínez y S. Palomares-Sánchez, (1995): *Bol. Soc. Mex. Fís.*, 9-2, 89
- Rodrigo, M.J., A. Rodríguez y J. Marrero, (1994): *Aprendizaje Visor*,
- Rodrigo, M.J. (1994): *Investigación en la Escuela*, (23), 7

Pérez, D.G., (1994):*Investigación en la Escuela*, (23), 17

Martínez, J.R., B. A. Trujillo-Colorado y S. Palomares-Sánchez, (1996): en *Divulgación de la Ciencia y enseñanza escolarizada*, Memorias del V Congreso Nacional de Divulgación de la Ciencia, (1996) 169; M. Mirabal-García, S. Palomares-Sánchez y J.R. Martínez, en *Divulgación de la Ciencia y enseñanza escolarizada*, Memorias del V Congreso Nacional de Divulgación de la Ciencia, México 145

Slisko J., (1995):*El Cronopio*, FC-UASLP, (3), 38

Medellín-Anaya H. y G. Ortega-Zarzosa, (1999):*Prácticas virtuales de física*, FC-UASLP,