

INTRODUCTION TO THE HISTORY OF LENSES AND VISUAL CORRECTIONS: A REFERENCE TO SPAIN AND THE SPANISH COLONIES IN THE NEW WORLD (XV-XVI C.)

María Luisa Calvo*, Departamento de Óptica, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España

Jay M. Enoch**, School of Optometry, University of California, Berkeley, USA

ABSTRACT

Archaeological optics is a branch of science studying the early history of lenses, optical devices and introduction of visual corrections from ancient civilizations up to our modern world. The first known lenses were located in Egypt, (ca 2600 BC). There are well documented studies of discoveries addressing the early use of corrective lenses. However, little information exists relative to discoveries relating to early lens and mirror use in the American continent. We address early use of corrective lenses in Spain and in the Spanish Colonies in the New World, emphasizing the XV-XVI centuries. We report documents obtained from the Archives of the Indias, (Seville, Spain) indicating presence of limited optical technologies in Cuba, Mexico and Peru. Also, we refer the discovery of a copy of a portrait of an early Viceroy of New Spain, Luis de Velasco (the Son), located in the Pecos National Monument, Santa Fe, New Mexico. It has been confirmed that the original portrait is located at the Museum of the Castle of Chapultepec, Mexico City, Mexico. We have pursued inquiries searching for a link between this discovery and the early use of lenses in Spain *per se* and also in relation to the personal history of this Viceroy. Studies at the Archives of the Indias indicate the introduction of various technologies on the American continent, but the link is missing relative to contributions of ancient American civilizations (e.g., in Mexico and Peru). They had knowledge about astronomy and optical technology.

RESUMEN

La óptica arqueológica es una rama de la ciencia que estudia la historia de las lentes, de los instrumentos ópticos y de las correcciones visuales, desde una perspectiva del desarrollo de las antiguas civilizaciones hasta la época actual. Las primeras lentes de que se tenga constancia estarían localizadas en Egipto (2.600 años AC). Existen estudios bien documentados que refieren el descubrimiento de lentes para correcciones visuales. Sin embargo, no se dispone de información suficiente relacionada con el uso de lentes correctoras y de espejos, para ciertas aplicaciones, en el continente americano. Nos referimos en este trabajo al uso de lentes correctoras en España y en las colonias del Nuevo Mundo con especial énfasis en los siglos XV y XVI. Se presentan documentos consultados en el Archivo General de Indias (Sevilla, España) que indican la presencia de ciertas tecnologías ópticas en Cuba, México y Perú. Igualmente, los autores refieren el descubrimiento de una copia de un retrato del Virrey de Nueva España, Luis de Velasco (hijo), localizada en el Museo de Pecos, Santa Fé, Nuevo México. Se ha confirmado que el retrato original estaría emplazado en el museo del Castillo de Chapultepec, Ciudad de México. Los autores han proseguido investigaciones con objeto de encontrar un vínculo entre este descubrimiento y el uso de lentes correctoras en la España del s.XV *per se* así como en relación con la historia personal de este Vicerrey. Los estudios llevados a cabo en el Archivo General de Indias indican la introducción de varias tecnologías en el continente americano, pero hay un "eslabón perdido" relativo a las contribuciones que pudieron proporcionar las antiguas civilizaciones americanas (por ejemplo, en México y Perú). Es sabido que poseían vastos conocimientos en astronomía y algunas técnicas ópticas.

1. INTRODUCTION

Archaeological optics is branch of science dedicated to the study of the early history of lenses, optical devices, and to the introduction of visual corrections from ancient civilizations to modern times [1].

The first known lenses have been located in Egypt (ca 4630 BP: Before the Present time); later lenses were encountered at other sites in the Middle East and the Greek Islands [2]. Mirror use can be traced

back 8000 BP in Anatolia (located in south-central modern Turkey). Mirrors latter appeared in Egypt and Mesopotamia.

Early optical discoveries on the American continent occurred remarkably early and are only poorly documented. By about the year 4000 BP (2000 BC) mirrors appeared broadly throughout the Middle East, Greece and Etruria, Asia and China, and surprisingly in the New World. Mirrors in Western Asia, Egypt and in Eastern Mediterranean areas

E-mail: *<mlcalvo@fis.ucm.es>

**<jmenoch@berkeley.edu>

were different in design from later Siberian and Chinese structural models. After first discoveries of mirrors in the New World, mirrors were found in Peru during the Chavin culture, then the Moche culture, and in Mexico to the North (the Olmec civilization in Central America). Rock crystal ground lenses were apparently in use during the Moche culture (Peru) and later were also known in Mexico. Grinding and polishing skills were key elements in mirror and lens evolution. These technologies emerged early, and probably were associated with modification of "hard rock" materials.

Limited early discoveries of lenses used for corrective lenses have been reported in Spain and in the Spanish Colonies in the New World (XV-XVI C). Our main objective has been to investigate the links between the early development of corrective lenses in Spain and their later introduction into the New World. The latter analysis has centered upon lenses worn by an early representative of Spain in the New World, the Viceroy of New Spain, Luis de Velasco (the younger). In order to clarify events occurring, we sought to determine his personal history as well.

And to place matters in context, we searched the Archives for links related to ancient Native American civilizations (e.g., in Mexico and Peru), but the latter are missing. In this preliminary study, we found important ties to astronomical instruments and glass technology, and learned about the presence of rather astonishing optical technologies in very early stages of the pre-Columbian civilizations.

2. OPTICS IN ANTIQUITY: SOME OVERVIEW

The origins of archaeological optics are unknown and linked to the study of the first *known* lenses and mirrors. We can quote here the sentences of the philosopher Seneca, a Roman citizen who was born in the city of Cordoba (ca 2000 BP-2061 BP): *"I have already said there are mirrors which increase every object they reflect. I will add that everything is much larger when you look at it through water. Letters, however tiny and obscure, are seen larger and clearer through a glass ball filled with water"*.

At an earlier time, we need to consider some important factors: Miniaturization in art and written letters has existed from ca 5300 BP. Micro-cuneiform text written on clay tablets in Mesopotamia can be observed in quite a number of Museums. As added examples, the Egyptians created figures with details less than 1mm in height. Miniaturized Hebrew texts have been found in phalacteries located near the Dead Sea (Princeton Theological Seminary).

The first *known* mirrors were manufactured and polished by 8000BP, earlier human civilizations created/employed natural water mirrors. The first

known fabricated mirrors were found in graves in Anatolia in the region of the Neolithic settlement of Çatal Hüyük. They are polished obsidian mirrors, c.a. 9 cm in diameter. One is mounted on a stand and the formed reflected images are recognizable, and in some instances they are outstanding.

As noted, first *known* lenses were located in Egypt (ca 4630 BP) and were superb. They were made from rock crystal, had a convex front surface, and a flat posterior surface with a centered ground small-radius concave curve located at its center.

Visual corrections (lenses and mirrors, mainly the latter) were used before the time of Christ. The use of mirrors and a water-filled lens by Seneca (he lived from ca 4-65 AD), cited just above, were used by him as a visual correction for presbyopia and magnification. Spectacles date from ca 1280 (XIII C) in Northern Italy.

3. THE PRE-COLUMBIAN AMERICAN CIVILIZATIONS: SOME AVAILABLE DATA

Here, we consider representative pre-Columbian civilizations where evidence of utilization of optical technologies has been identified. As examples, in Mexico and Central America there were the Olmec civilization which was located near modern Villahermosa, elegant Mayan centers such as in Chichén Itzá in the Yucatán peninsula, evidence of lens and mirror use in Chiapas State. In Chichén Itzá there was an astronomical site which was constructed with additional elements for inspecting the sky. The latter were stone columns with water located on at the top of columns. These which were used to create water mirrors (see Figs. 1a and 1b).

The Aztecs and Olmecs were also developing and manufacturing mirrors. Olmec mirrors, made of obsidian, range in dates from 3125-2130 BP, had remarkable quality and the appearance of mirrors continued up to at least the Teotihuacan civilization a few centuries before Spanish colonization which occurred in ca 500 BP [3]. These mirrors had very interesting properties:

- i) Greatly advanced techniques were used for forming these mirrors.
- ii) The artisans apparently had knowledge of the properties of various minerals and mineral-related substances such as obsidian (SiO₂) which has properties similar to quartz, with the exception that obsidian is an amorphous material. It is softer than quartz, with Mohs values (a scale for measuring hardness) of 5.0-5.5. Obsidian also exhibits a form of conchoidal surface fracture.
- iii)

The color of an obsidian rock can be black, grey, brown, dark green or white transparent.

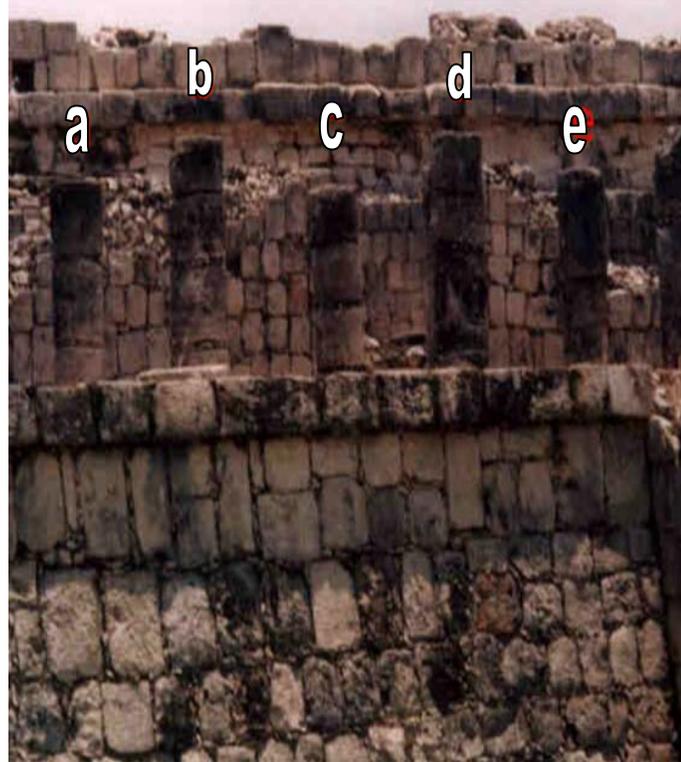


Figure 1. a) An astronomical site at Chichén Itzá.

b) Red letters indicated the locations of water mirrors.

South-American civilizations also utilized optical technologies. Additionally, they developed valuable techniques for polishing, melting of metals, and for sculpting precious or semi-precious rocks. For obvious reasons, we cannot enter here into deeper consideration of possible connections between Meso-American and South-American pre-Columbian civilizations. Certain facts indicate that similarities were found in types of mirrors developed and techniques applied. Many ancient cultures in this continent have been studied. We only mention here aspects that help to clarify optical developments occurring among Chavin, La Tolita, and Moche peoples (see Figure 2).

An ancient South-American civilization is the Chavin culture (c.a. 2900 BP - 2200 BP). The Chavin people settled in the North-Eastern part of Peru. They were located North of the region where the center of the Inca civilization developed. The Chavin people constituted an original Andean culture. They constructed impressive sites and religious centers. Evidence was found for utilization of optical techniques for polishing remarkable quality mirrors made from anthracite (Figure 3). See Appendix I for a more extended, and to our knowledge, original study of technical aspects of these mirrors.



Figure 2. A map showing the location of ancient civilizations in Peru.



Figure 3. Reproduction of two Chavin mirrors from the private David Bernstein's collection, New York.

The so called La Tolita culture (c.a. 2600 BP - 2300 BP) was developed in Southern Colombia-Northern Ecuador. These people settled near the Santiago river. La Tolita Island was predominantly a necropolis. At archeological sites evidence is provided for remarkable burial ceremonies and grave contents, e.g., masks. Refined manufacturing techniques for working gold and polishing precious stones were clearly introduced by these people.

The Moche culture dated from 2200 BP to 1200 BP. These people settled in river valleys along the Northern Peruvian coastline. Moche art became predominant in the region. This civilization lasted almost five centuries and underwent five phases of development. There are fine examples of elegant rock crystal and glass necklaces and pendants, lenses, jewelry (with lens-like polishing elements), and mirrors made of copper (Figure 4).

4. POST-COLUMBIAN DEVELOPMENTS: THE TECHNOLOGIES IN THE SO-CALLED NEW SPAIN (XV AND XVI C)

Pre-Columbian and Post-Columbian civilizations developed in parallel for a certain period of time. Both benefitted from sharing knowledge. Over the course of centuries, a number of historians from both sides of the Atlantic have studied the importation and export of many products. Some examples of technical and economical data obtained in the XVI C focus upon:



Figure 4. Reproduction of a Moche mirror. Metropolitan Museum of Art, New York City. Jan Mitchell Treasury for Pre-Columbian Works of Art in Gold, New York.

- a) **Agriculture:** production of cereals, tropical products (e.g., sugar cane), dye substances for the textile industry, exploitation of silk.
- b) **Civil construction:** As an example, irrigation systems.
- c) **Mines:** Gold and silver exploitation [4]: This was an important factor serving to stimulate increased internal and external commerce. One of these was the introduction of new chemical techniques utilizing quicksilver ("azogue"). This is an amalgam formed using mercury and salt. It was later used for manufacturing mirrors and introduced by B. Medina, in the years 1550-1560 in Mexico.
- d) **Navigation and scientific travel:** Cristobal Columbus was not only an experienced navigator but he was also very interested in many aspects of the scientific instrumentation used for observation of various phenomena. He discovered a magnetic line without declination in the Atlantic. Another important example was Father A. De Urdaneta who wrote a number of volumes addressing fundamentals of meteorology, the analysis of winds, and the origin of cyclones.
- e) **Medicine, pharmaceuticals and botanicals:** An enormous number of scientific and technical publications were produced by many researchers of that époque. Quite a number of these were developed in the Americas [5].

5. EARLY VISUAL CORRECTIONS AND OPTICS IN SPAIN: EARLY APPROACH

Even today, there are only limited archival references available to the optical sciences and technologies in Spain for dates prior to the XVth C. One must consider several historical facts: Periods of great unrest occurred in the Iberian Peninsula due to multiple invasions from the North and the South. The most valuable sources are artistic representations researchers found in paintings, sculptures, religious monuments, and on medals[6]. Other facts that can create some difficulties are the availability of the historical archives. Many of them are located at religious sites and on some occasions are not accessible. Civil archives are also of great importance, we can mention the General Archive of the Indies (Sevilla, Spain), the Archives of the Mexican Nation (Mexico City, Mexico), the Biblioteca Nacional, (Madrid, Spain), and the numerous Archives located also in Ibero-American countries. But it is evident that the great dispersion creates a hard task when one tries to recuperate different époque elements. Other sources have origin in literary works and documentation from Spanish historians (mainly outside of the technical world).

The earliest and first known technical book edited in Spanish is the one from Benito Daza de Valdés (XVII C.), edited and printed in Sevilla in 1622, a reproduction of the front page is shown in Figure 5. One can read: *On the use of spectacles (antoios or "antojos" in old Spanish) for all kinds of vision. In which one teaches how to know the gradations each person is missing in his vision, and (properties of) those who already have spectacles. Licenciante Benito Daça de Valdés. From the Sainted Official of the City of Sevilla. Dedicated to Our Lady of Fuensanta, City of Cordoba.* We may notice that B. Daza de Valdés was a clerical belonging to the Inquisition movement. Inquisition played a determinant role all over Europe, during the middle XVI and XVII centuries, avoiding the spreading of new scientific theories which were considered heretical. Other European or World sources related to the then current technical works appearing in Spain during this period of time are very limited and not always as objective as desired, due to the so-called Black Legend, creating the vision of a dark and tyrannical time.



Figure 5. The front page of the first known book written in Spanish on visual corrections (Sevilla, 1622).

6. OUR FINDINGS:

PORTRAIT OF VICEROY LUIS DE VELASCO (THE YOUNGER)

In Figure 6 we display a reproduction of a portrait of the Viceroy of New Spain, Luis de Velasco y Castilla, also named “The Younger” or “The Son”, in order to prevent confusion with his father, also Viceroy and having the same first and family names. This painting was created during his first term as the eighth Viceroy of New Spain (1590-1595). He also served as the eleventh Viceroy in 1607-1611.



Figure 6. A portrait of Viceroy Luis de Velasco. He is wearing spectacles.

We are giving here some available data on this painting:

1. A photographic copy (B&W) was found by one of the authors (JME) at the Museum of the Pecos National Historical Monument, near Santa Fe, New Mexico, United States of America.
2. The original painting (in color) was previously located at the Viceroy Gallery, Chapultepec Castle, Mexico City, Mexico. Currently it is located at Museo Nacional del Virreinato, Mexico City.

3. A similar painting, but with a white beard, exists representing his second term as Viceroy. In other previous works [7-8] we studied the possibility as to whether the spectacles were obtained in Mexico City, or alternatively in Spain or other European regions. There are still uncertainties today relative to this question. The main reason is the mixing and sometimes controversial data that we have obtained from various sources in archives and publications in Spain. At the moment of writing this article the authors are convinced that inspection of archives in places as Mexico City, Lima and other Ibero-American cities are compulsory. Therefore, the subject needs added time for it’s resolution. It is clear that the spectacles would have had to be maintained in Mexico for periods of time.

To have an idea of the most important aspects of his life and the historical context we provide some relevant data in Table I.

Table I. Chronological data of Luis de Velasco.

Chronology based on documentation from the Archivo de Indias, Sevilla (Spain)	
1532	Luis de Velasco (Son) Born in Carrión de los Condes (Palencia, Castile, Spain).
1550	(he was 18 years old) Leaves Spain for Mexico.
1550 - 1585	in Mexico (he resided in the New World for 35 continuous years).
1585 - 1590	Resided in Spain and Italy (largely serving as Ambassador to Florence).
1590 - 1595	Returns to Mexico. His first period as Viceroy of New Spain.
1595 - 1602	Peru (Lima), served as Viceroy of Peru.
1602 - 1607	Peru? Mexico? No data.
1607 - 1611	Mexico, Second Period as Viceroy of New Spain.
1611	Leaves Mexico for Spain.
1611 - 1617	Served in Spain as President of the Council of the Indias.
1617	Died in Seville, Spain (age ca 85).
Other relevant data	
1534	Bishop Juan de Zumarraga established the first New World printing press in Mexico City. The press was transported from Seville.
1553	The University of Mexico was founded. (In Spain: University of Salamanca, Pérez de Oliva, Chair of Light and Magnetism).
1577	F. Alonso de Veracruz founded Saint Paul College, (Mexico), containing an important library. Use of maps, terrestrial globes and scientific instrumentation. Author of <i>Physica Speculatio</i> .

**7. SOME FINDINGS LOCATED
AT THE “GENERAL ARCHIVE OF THE INDIAS”
IN SEVILLE, SPAIN**

In the visit performed by one of the authors (MLC) to the General Archive of Indias, in the city of Sevilla (Spain), there were investigations on the number of archives related to the *époque* of the Viceroy (father (2nd Viceroy) and son). These Archives are digitized and one can find more than 10,000 entries alluding to the time of Viceroy Luis de Velasco. Many of the entries relate to commercial activities, export-import matters, mining aids and other needs for local development of industries. In this aspect we have to admit that a more refined and detailed search is required.

The so-called section for “Maps, Charts, Engines and Samples” was dedicated to catalogues of devices for various technical purposes. We have selected those that to our appreciation are related with optical technologies:

1. Series of astronomical moon observations (Puerto Rico, 1561-1600 AD).

2. Design for a grid system and “spy glass” dated 1633 (unknown location).
3. A number of military patents, objects for sailing, and a magnifier used to inspect fabrics were also found at the Archive in our search.
4. Designs for the basement of the installation of a telescope located on the jutting rock of “El Morro”, Port of Havana (archive entry in 1809, but plans may be older). This design is shown in Figure 7. It was probably done by pencil, since the quality of the original reproduction was very low, and an additional digital treatment of the image was applied in order to enhance the contrast. The author or authors is/are unknown.
5. There is an interesting and curious hand drawing design for a “*hydroandric machine for wear under water*” (for scuba diving activities). The design is signed by Alejandro Durand, and it was originally dated in Lima, Peru, in 1720, see Figure 8. The text indicating the points F.F. (for the eyes) reads: “*Eye spectacles made in glass for the vision of the scuba diving*”.

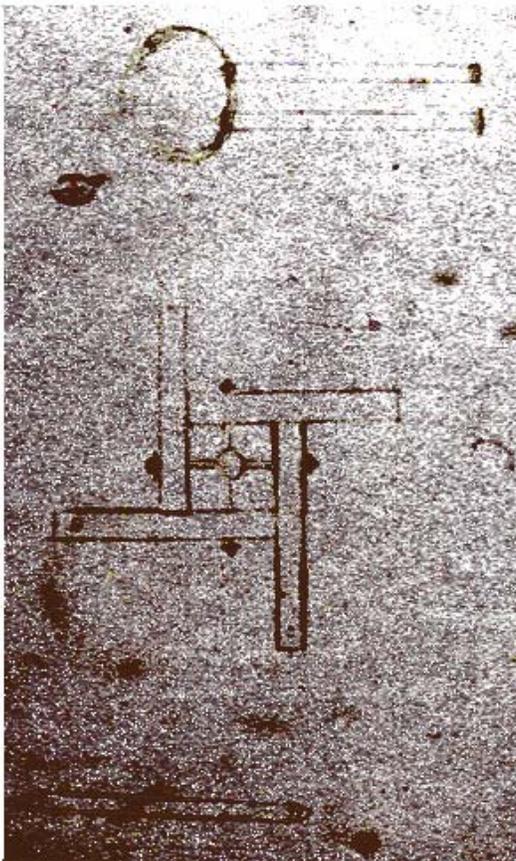


Figure 7. Design for the installation of a telescope in “El Morro”, La Havana Port, Cuba.



Figure 8. A curious design for scuba diving, Lima, Peru, 1720.

8. CONCLUSIONS

From the previous results and findings several conclusions are drawn: 1. The lens technology necessary for visual corrections, and provision and maintenance of spectacles could have been available in the New World Spanish Colonies during the time of Luis de Velasco (the Son) as Viceroy. 2. The Viceroy would have had access to information regarding this technology. His spectacles could have been obtained in Spain, the Netherlands, or in Italy. 3. One has to distinguish between first spectacle use and first known use of visual corrections devices in the Americas, New Spain and in the future United States. 4. We cannot state whether any sea captains or crews of exploration vessels wore visual corrections (it would not be surprising). Other questions relating the existence of optical technologies in the Pre-Columbian

civilizations also require deeper analysis. The search for connections is always a difficult task. Nevertheless, the authors are now pursuing additional studies.

ACKNOWLEDGMENTS

Partial results of this work were presented at "Optics, Life and Heritage", La Havana, Cuba, 26-30 September 2004. We thank the Spanish Ministry of Science (Grant TIC 2002-01846) and the Rectorate of the Complutense University of Madrid for financial support. The results of Appendix I were obtained with the technical and scientific assistance of Oscar Martínez Matos and José A. Rodrigo. The anthracite samples were provided to us by Ana Manzanares, from GreenLight Solutions. The assistance of the documentalists of the Archive of Indias are also acknowledged.

APPENDIX I

Optical properties of anthracite surfaces¹

We have studied the optical properties of anthracite. It is a bituminous organic coal, a metamorphic rock, with black color. It presents a high luster. The Mohs hardness is 2.5–4.0. The refractive index values are: 1.64-1.68 (for 589 nm), there were high reflectivity properties. Pleochroism was not noted. The mirror appearance can be that of crystal or stone, and it can have massive size. As to other properties, when the surface is rubbed it can become electrically charged.

Peru has one of the World's largest minefields for charcoal. It has been exploited from the very early days of the pre-Columbian civilizations. These mines are located all along the Andes mountains with very important mine locations at Chacamarca [4] (not far from the earlier settlement of the Chavin civilization!).

We have obtained two samples of anthracite from Northern Spain charcoal mines (see Figure A1). The two blocks were cut under two different directions, namely, parallel and perpendicular to the plane of exfoliation. These planes define layers with easy mechanical cleavage. After obtaining the samples a standard polishing procedure was applied (with water and fabric on metallic surface). A laser source (a solid state laser emitting in green: 552 nm) was used to illuminate the surfaces. A CCD camera captured light reflected from the surfaces (see Figures A2a)-A2b)). The corresponding line profile of the images (obtained from a digital treatment [9]) has information on the reflectivity efficiency. Figure A2g) displays the image of the beam.

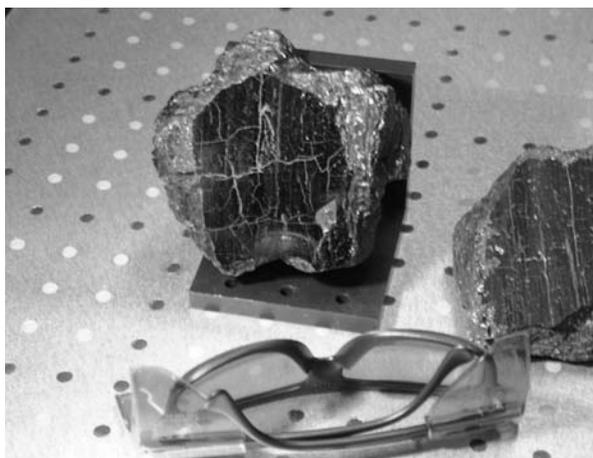


Figure A1. Two anthracite mirrors obtained in our laboratory. The right one was cut parallel to the exfoliation planes, and the left one was cut perpendicular to the same planes. See the reflections of the goggles.

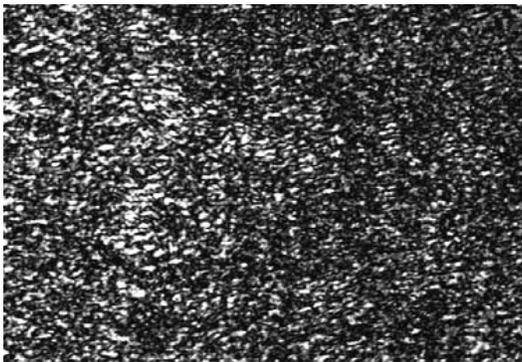
Figures A2c) - A2d) show the corresponding line profiles. In order to have a more accurate data we have applied the Fast Fourier Transform (FFT) to the images (Figures A2e) - A2f)). It gives us the two spectra associated to reflected light of the two surfaces, respectively, and in 3-D. One can state that the reflectivity depends on the form of the preparation of the sample. The cut perpendicular to the plane of exfoliation shows a higher efficiency, may be also due to the state of its partial polarization. This is due to the presence of micro layers. These are same are highly reflective as can be seen when observed directly with the naked eye. The use of

¹The results of this Appendix have been obtained with the collaboration of Oscar Martínez Matos and José A. Rodrigo, from the Department of Optics (UCM) and Ana Manzanares, from GreenLight Solutions.

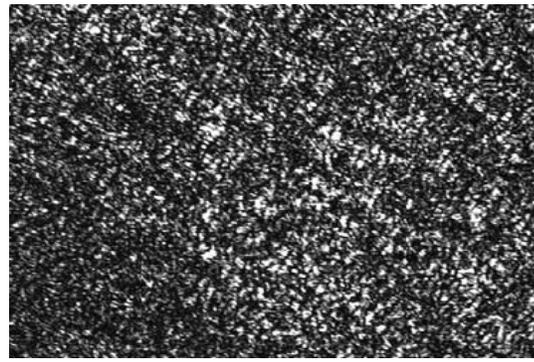
direct exfoliation planes would allow the Chavin artisans to obtain the desired reflective surfaces, and then probably a simple polish was applied. Nevertheless, when observing the reproduction of old Chavin mirrors it is not clear how best to appreciate

the quality of the surfaces, and we cannot conclude if polishing techniques were applied as well.

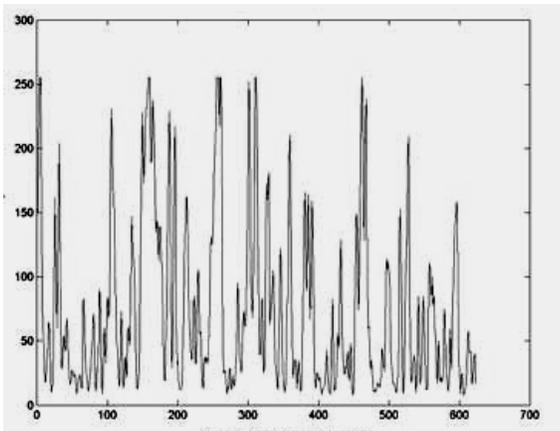
These aspects are now under current study by the authors.



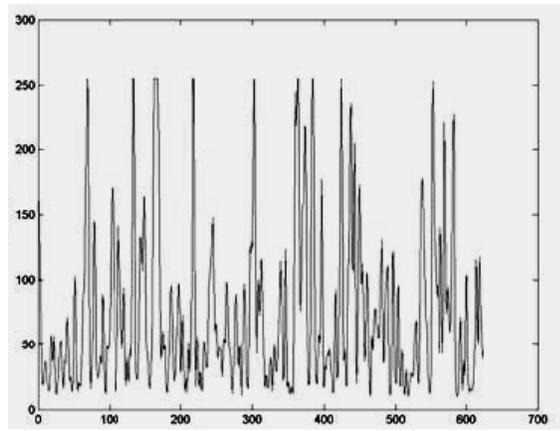
(a)



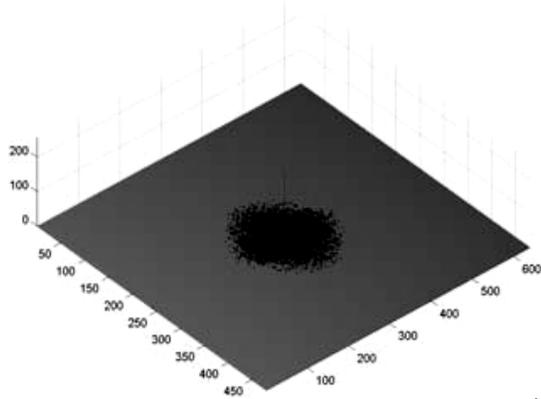
(b)



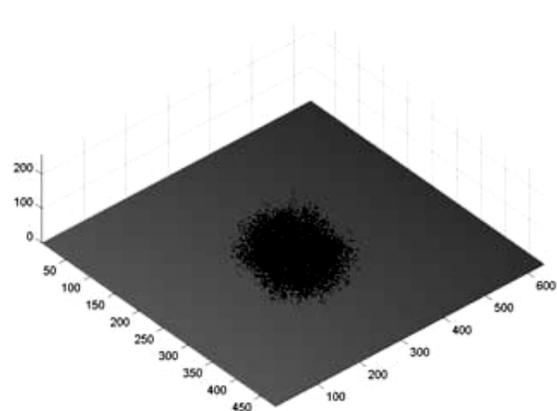
(c)



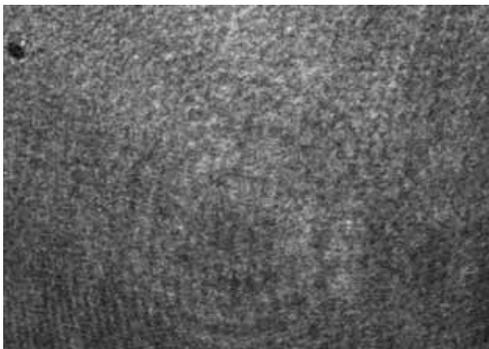
(d)



(e)



(f)



(g)

Figure A2.

- a) Image of reflecting light from anthracite surface cut perpendicular to the planes of exfoliation.
- b) Image of reflecting light from anthracite surface cut parallel to the planes of exfoliation.
- c) and d) the respective line profiles.
- e) and f) the respective Fourier spectra represented in 3-D.
- g) Image of the incident beam light prior to suffer from reflection of the surfaces.

REFERENCES

1. ENOC, J.M. (2002): "Archaeological Optics", In: **International Trends in Applied Optics**, 5, International Commission for Optics - ICO, Ed. A.H. Guenther, SPIE Press, chapter 27.
2. _____ (2002): "Introducción a la historia de las lentes y correcciones visuales: una referencia a España y a los territorios del nuevo mundo", in: **Óptica Avanzada** (M.L. Calvo, coord.), Chapter 1, Ed. Ariel, Barcelona (contains many references).
3. LUNAZZI, J.J. (1996): "Olmec Mirrors: an Example of archaeological American mirror", In: **International Trends in Optics**, 3, International Commission for Optics - ICO, Ed. Anna Consortini, Ac. Press., chapter 22, p.p. 411-421, including a color picture.
4. ESPÍ, J.A. (2001): (Ed.), *El Libro de la Minería del Oro en Iberoamérica*, CYTED-Comité Aurífero del Perú, Madrid.
5. BARREIRO, A.J. (1928): "La ciencia española en s. XVI", en: *Reivindicación histórica del s. XVI*, Curso de conferencias en la Real Academia de Jurisprudencia y Legislación, Madrid.
6. ENOCH, J.M. y M.L. CALVO (1998): "Una evidencia del uso de lentes correctoras en la España del s. XV", **Ref. Esp. Fis.** 12(2), 55-57.
7. CALVO, M.L. y J.M. ENOCH (2002): "Acerca del uso de lentes correctoras en las colonias españolas del nuevo mundo: una referencia al Virrey Luis de Velasco y la tecnología de su época (s.XVI)", **Óptica Pura y Aplicada**, 33, p.p. 1-6.
8. _____ (2003): "Early use of corrective lenses in Spanish Colonies of Americas including parts of the future United States: Reference to Viceroy Luis de Velasco (the Son)", **Optometry and Vision Science**, 80(1), (October).
9. CALVO, M.L.; T. ALIEVA; J. RODRIGO; D. RODRÍGUEZ y T. ALIEV (2004): **Laboratorio virtual de óptica. Guía práctica**. Delta Publicaciones. Madrid.

PHASE SPACE METHODS FOR OPTICAL PROCESSING OF BIOMEDICAL INFORMATION

Tatiana Alieva*, Universidad Complutense de Madrid, Facultad de Ciencias Físicas, Madrid, España

ABSTRACT

The application of optoelectronic techniques, based on Fourier transform, bilinear distributions, fractional transformations, for biomedical information processing: filtering, segmentation and classification of biomedical images, characterization of optical manipulators, recovering of statistical tissue properties, is discussed.

Key words: Optical information processing, fractional transforms, bilinear distributions, optical manipulation, medical imaging

RESUMEN

En el trabajo se discuten la aplicación de técnicas optoelectrónicas basadas en la transformada de Fourier, distribuciones bilineales, transformadas fraccionarias para el procesado de la información biomédica: filtrado, segmentación y clasificación de imágenes biomédicas, caracterización de manipuladores ópticas, reconstrucción de las propiedades estadísticas de tejidos, etc.

INTRODUCTION

Nowadays optics is playing an important role in acquisition, processing and archiving of biomedical information. Special algorithms for analysis and classification of biomedical information are creating for computer processing of biomedical signals and images in order to simplify the feature extraction by clinicians and researchers. Within the foreseeable future telemedicine, automated screening and diagnosis are expecting to become common in everyday health care.

In biomedical information processing optics has certain advantages with respect to commonly used digital electronic computing due to its massive parallelism, operating with continuous data, possibility of fuzzy logic implementation and direct penetration into data acquisition process. Medical images usually contain large amount of information, which sometimes has to be processed in real time. The digitalization of the original analog image, obtained for example in radiography, often reduces the image quality. These facts underline the advantages of optical processing techniques: parallel processing and operating with continuous data. Moreover optical methods of information processing can be directly incorporated in the acquisition process in some optical modalities.

Note also that almost all typical tools applying in digital data processing can be implemented in optics [1-4]. Thus filtering and correlation operations can be performed by optical correlators, some joint phase space distribution such as WD and Ambiguity function, fractional transforms are actively used in optics.

Optical wavelet transform can be applied to perform the multiresolution analysis. The fuzziness of typical optical phenomena such as diffraction and interference provide the possibility implement optical fuzzy logic. The holographic principles are applied for construction associative memories and neural networks.

The disadvantages of optical image processing systems mainly lie in low flexibility and programmability of optical systems, input/output problem and complexity of system maintain.

The application of optoelectronic techniques, based on Fourier transform, bilinear distributions, fractional transformations, for biomedical information processing will be discussed in this contribution.

OPTICAL FOURIER PROCESSING IN BIOMEDICAL IMAGE ANALYSIS

One of the principal operations used for the signal/image analysis is the Fourier transform. Optical implementation of this operation is based on the ability of a thin lens to produce the two-dimensional Fourier transform (FT) of an image on its back focal plane. The effectiveness and limitations of optical analog and digital methods for Fourier transform calculations applied for medical image analysis have been compared in [5]. It was concluded that both techniques are competitive.

The optical Fourier transforming systems are used for spatial frequency content analysis, or as a part of optical information processing system performing for example filtering and correlation operations.

One of the possible applications of Fourier spectra is estimation of fractal dimension of biological structures. Optical examination of fractal structures was first proposed in [6]. Recently it has been proposed to characterize the fundus eye photograph by the slope of log log spectrum [7], which is related to fractal dimension. This approach makes possible optical analysis of fractal characteristics of retina photograph.

A typical optical scheme used for filtering or correlation operations includes the cascade of optical Fourier transformers. The filtering permits to extract the features of the medical images meanwhile the correlation allows to detect automatically the similarities of the compared images. The comparison of digital and optical correlators, made in [8], demonstrates the superiority of optical correlators in terms of parallelism and processing speed.

The disadvantages of optical image processing systems mainly lie in the complex structure of the required optical system and their small flexibility. Some steps have been done to create self-adaptive optical Fourier filtering system using photoinduced dichroism in a bacteriorhodopsin (bR) film [9]. The bR film produces the angular rotation of the polarization of the illuminating beam depending on its intensity. The combination of bR film and analyzer composes the filter set up which controls the pass of spatial frequency components. In particular application of this optical scheme for enhancement of the high frequency components of mammograms allows showing up the microcalcification clusters buried in surrounding tissue.

PHASE SPACE DISTRIBUTIONS IN OPTICS

Besides the FT operations phase space methods are widely applied in data processing such as phase retrieval, patterns recognition, filtering, signal and system characterization, texture discrimination, analysis and modeling of biological signals.

Phase space distributions provide information about the signal amplitude and phase in term of joint position and momentum representation and therefore localize in the framework of uncertainty principle a given temporal (or spatial) frequency in time (or space). The Wigner distribution (WD) is probably one of the better known phase space distributions. It was introduced for the application in quantum mechanics by Wigner in 1932 [10] but further was widely used in information processing and optics in particularly for the description of partially coherent fields. The WD of one dimensional signal is defined as

$$W(x,u) = \int_{-\infty-\infty}^{\infty} \int_{-\infty-\infty}^{\infty} \left\langle f\left(x + \frac{1}{2}x'\right) f^*\left(x - \frac{1}{2}x'\right) \right\rangle \exp[-i2\pi(ux')] dx' \quad (1)$$

where brackets stand for the case of nonstationary signal which is equivalent to partially coherence in optics. The WD is always real-valued but not necessarily positive; it preserves position and frequency shifts, and satisfies the marginal properties. Thus the projection of the WD in axis x corresponds to the instantaneous power and the projection on the frequency axis u to the Fourier power spectrum.

The WD is closely related to the canonical fractional Fourier transform (FT) [11, 3, 4], which is the generalization of the ordinary FT. The kernel of the fractional FT depends on the parameter α which can be interpreted as a rotation angle in phase space. The fractional FT of a signal $f(x)$ for angle α is defined as

$$F_{\alpha}(u) = R^{\alpha}[f(x)](u) = \frac{\exp(i\alpha/2)}{\sqrt{i \sin \alpha}} \int f(x) \exp\left(i\pi \frac{(x^2 + u^2) \cos \alpha - 2xu}{\sin \alpha}\right) dx. \quad (2)$$

Thus for $\alpha = 0$ it corresponds to the identity transform, for $\alpha = \pi/2$ and $\alpha = 3\pi/2$ it reduces to the FT and inverse FT, correspondingly. Moreover $F_{\pi}(u) = f(-u)$. The fractional FT is continuous, periodic $R^{\alpha+2\pi n} = R^{\alpha}$, and additive $R^{\alpha+\beta} = R^{\alpha}R^{\beta}$ with respect to the parameter α . The inverse fractional FT is the fractional FT for angle $-\alpha$. The optical set up for the fractional FT for a certain α can be obtained from the conventional FT transformer changing equally the distances between the lens and the input/output planes. Note that the fractional FT systems are used for the shift-variant filtering, which is attractive for the processing of some biomedical images.

The squared moduli of the fractional FT, also called fractional power spectra, correspond to the projection of the WD upon the direction at an angle α in phase plane. The fractional power spectra play an important role in optics, because they are related to the intensity distribution at the output plane of the fractional FT system and therefore can be easily measured. The set of the fractional spectra for α from $[0, \pi]$ defines the Radon transform of the WD. The WD can be obtained from the set of fractional spectra applying the inverse Radon transform or other iterative procedure usually used in tomographic reconstructions. This is a basis for phase-space tomography [12] -a method for experimental determination of the complex field amplitude in the coherent case or mutual intensity for the partial coherent fields from the measurements of only intensity distributions. Application of the cylindrical lenses makes possible the reconstruction of two dimensional fields.

Other methods of reconstruction of the WD of spatial and time optical signals were proposed in [4, 13]. In particular the heterodyne method of WD measurements has been found very useful in the applications to optical coherence tomography. It was demonstrated that the mean square heterodyne beat signal, measuring in the real time, is proportional to the overlap of the Wigner distributions of the local oscillator and signal fields [13].

Wigner distribution, fractional FT are nowadays actively used in optics for description of coherence properties of light, beam design and characterization, shift variable filtering, encryption, design of neural networks. Some of these applications are also beneficial for biomedical information processing.

PARTIALLY COHERENCE LIGHT IN BIOMEDICAL IMAGING

Nowadays actively developed optical biomedical imaging techniques such as optical coherence tomography (OCT) [14,15] and optical coherent microscopy (OCM) [16], etc. use partially coherent light sources. OCT is a non-invasive, noncontact imaging modality for cross-sectional imaging of biological tissue with micrometer-scale resolution. OCT imaging is produced by measuring the intensity of backscattered light from internal tissue and the echo time delay applying the interferometry techniques. OCT was first used clinically in ophthalmology for the imaging and diagnosis of retinal disease and then was applied to image subsurface structure in skin, vessels, oral cavity, respiratory, urogenital, and gastrointestinal tracts.

In general biological tissues are mostly characterized by their statistical properties. The formalism of the WD is very useful for the description of coherence properties of light reflected from the tissues. It was suggested in [17] to create a novel OCT modality based on measurements of WD or its momentum width as a function of position in the tissue. The higher sensibility of the transversal coherence to the changes in scattering coefficient than the conventional OCT system that probes the corresponding change in the backscattering coefficient might lead to an improved contrast in the obtained images. The modified heterodyne optical phase space method proposed in [13, 18] allows simultaneously measuring of longitudinal and transverse coherence properties of broadband light sources, used in OCT.

Recently it has been shown that, by use of the spatial coherence properties of an incident field and a simple detection configuration, the two point correlation function of a random scattering potential can be determined [19]. The method, called variable coherence tomography, is based on collecting the scattered intensity along only one direction. In this

method the incident beam which has a high degree of spatial coherence only between two points with desired variable separation is used. The phase space methods and in particular the WD can be applied for the design and characterization of these beams.

WD FOR BEAM CHARACTERIZATION

The qualitative characteristics of light beam are very important in biomedical applications were they used not only as cutting instruments but also for non-contact optical manipulation of mesoscopic systems, characterized by the length scales of 10 nm to 100 micrometers, forces ranging from femto- to nano-newtons and by the time scales upward from microseconds [20]. In biology, this range covers many of the inter- and intra-cellular processes responsible for respiration, reproduction and signaling.

The normalized moments of the WD are usually used for optical beam characterization. The low-order moments represent the global features of the optical signal such as total energy, width, principal axes, etc. Thus the second-order moments of the WD are used as a basis of an International Organization for Standardization standard of beam quality. The combination of the second-order moments describes the orbital angular momentum of the optical beam, used for the description of optical vortices. The application of vortex beams for optical trapping in biology is very promising [20]. In general there are $N = (n+1)(n+2)(n+3)/6$ n-th order moments. All moments can be expressed through intensity moments measured after beam transformation by passing through the first-order optical separable systems, for example fractional FT systems. It was shown [4] that in order to find all n-th order moments one needs N fractional power spectra, where $N = (n+2)^2/4$ for even n and $N = (n+1)(n+3)/4$ for odd n . Moreover $N-(n+1)$ spectra have to be anamorphic.

NEURAL NETWORKS BASED ON THE FRACTIONAL FOURIER TRANSFORM

The high-level biomedical signal/image processing is related to the problems of data classification, model matching, linguistic description. The result of such interpretation may be a clinical diagnosis or understanding of some biological processes. These problems usually involve parallel processing of vast amounts of information. Since human beings (physician or researcher) are capable to solve these problems rather quick similar operations have been proposed for automatic decision making. They basically include Neural Network (NN) architectures, associative memories and fuzzy logic implementation.

Optical implementation of the NN offers the high number of neurons and interconnection density. Most optical NN uses free space interconnections.

Different configurations of the NN have been proposed [21]. Some of them can be considered as adaptive filters constructed by learning procedure. It was proposed to use the filtering in fractional FT domain to construct a one layer NN [22]. The two fractional FT operations represent two complex synaptic weights and linear summation. And the adaptively trainable filter plays the role of the nonlinear operator. For classification problems an additional sigmoid function may be used at the output. For the same number of input and output neurons, the fractional FT NN has much less adaptive elements and much simpler architectures than the standard perceptron. The architecture can be extended to multilayer configuration. It was shown that the NN using the fractional FT and mean square errors classifies patterns much better than similar one using original FT.

In general the selection of the input signal in the NN classification scheme is important for successful performance (minimal NN multilayer configuration, minimal error). The use of fractionally Fourier transformed input signals have been proposed in [23]. The appropriate fractional domain is selected by training for the best classification performance of the NN. The use of fractional FT pre-processing significantly improves the NN performance compared to both no pre-processing signals and pre-processing in FT. Note that the proposed configuration also can be implemented in optics.

Several beneficial applications of the NN in medicine have been already recognized. NNs are extensively used in diagnostic systems (detection of

cancer and heart problems), biochemical analysis (blood and urine samples, track glucose levels), image analysis (tumour detection, texture classification), drug development, etc. The appearance of the relatively cheap SLMs made the application of hybrid optoelectronic configurations in different areas including biomedicine very promising.

CONCLUSIONS

We have indicated only some directions of the implementation phase space tools used for optical processing of biomedical information. In reality there is a large list of powerful optical signal processing techniques which are directly incorporated in the information acquisition process or used for the processing of information obtained by different medical imaging modalities.

Optical biomedical data processing is especially beneficial if data are obtained by optical modalities and therefore processing system can be incorporated in the acquisition set up or if similar treatment of big amount of images (for example mammograms) have to be done (then the flexibility of optical system is not crucial). Application of optical neural networks for biomedical information processing and development of optical data fusion schemes is an open area for future research.

ACKNOWLEDGMENTS

T. Alieva thanks the Spanish Ministry of Science and Technology for financial support of this research ("Ramon y Cajal" grant and project TIC 2002-01846).

REFERENCES

1. JAVIDI, B. and J. L. HORNER, eds. (1994): **Real-Time Optical Information Processing**, (Academic Press, New York).
2. LI, Y.; H.H. SZU; Y. SHENG and H.J. CAULFIELD (1996): Proc. IEEE **84**, 720.
3. ALIEVA, T.; M.J. BASTIAANS and M.L. CALVO (2001): **Recent Research Developments in Optics** 1, 105.
4. _____ (2005): "Fractional transforms in optical information processing," **J. Appl. Signal Process**, to be published.
5. LI, Y. **et al.** (2002): **J. Biomed. Optics** 7, 255.
6. ALLAIN, C. and M. CLOITRE (1986) : **Phys. Rev. Lett. E** **33**, 3566.
7. RODRIGO, J.A. **et al.** (2003): Annual OSA meeting "Frontiers in Optics", Tucson, USA, 47, (5-10 October).
8. GHEEN, G.; E. WASHWELL and C. HUANG (1992): **Proc. SPIE** 1772, 96.
9. PANCHANGAN, A. **et al.** (2000): **Med. Phys.** 28, 22.
10. WIGNER, E.P. (1932): **Phys. Rev.** 40, 749.

11. MENDLOVIC, D. and H. OZAKTAS (1993): **J. Opt. Soc. Am.** 10, 1875.
12. RAYMER, M.G.; M. BECK and D.F. Mc ALISTER (1994): **Phys. Rev. Lett.** 72, 1137.
13. WAX, A. and J.E. THOMAS (1996): **Opt. Lett.** 21, 1427.
14. HUANG, D. **et al.** (1991): **Science** 254, 1178.
15. FERCHER, A. **et al.** (2003): **Rep. Prog. Phys.** 66, 239.
16. IZATT, J.A. **et al.** (1994): **Opt. Lett.** 19, 590.
17. YURA, H.; L. THRANE and P.E. ANDERSEN (200): **JOSA A** 17, 2464.
18. WAX, A.; S. BALI and J.E. THOMAS (1999): **Opt. Lett.** 24, 1188.
19. BALEINE, E. and A. DOGARIU (2004): **Opt. Lett.** 29, 1233.
20. GRIER, D.G. (2003): **Nature** 424, 810.
21. CAULFIELD, H.J.; J. KINSER and S.K. ROGERS (1989): **IEEE Proc.** 77, 1573.
22. LEE, S.Y.; and H.H. SZU (1994): **Opt. Eng.** 33, 2326.
23. BARSHAN, B. and B. AURULI (2002): **Neural Nets** 15, 131.

HOLOGRAPHIC PORTRAITURE OF HUMANS, PLANTS AND GHOSTS IN BELGIUM

Pierre M. Boonet*, retired from Laboratory Soete for Strength of Materials and Welding Technology, Belgium

ABSTRACT

The author describes his efforts to bring holography and its artistic applications out of the realm of mystery or curiosity. Three areas of the author's involvement are treated: first, how holographic portraits were successfully made in situ during a technology convention (it is believed that this was a world's first); second, how holograms of simple vegetal objects, viewable under normal lighting conditions, are being used to bring holography to a larger audience; finally, how collaboration between technicians and artists can lead to results that are satisfying and enriching for both parties.

RESUMEN

El autor describe sus esfuerzos para sacar la holografía y sus aplicaciones artísticas del mundo de lo misterioso, o de lo curioso. Se tratan tres áreas de su labor. Primero, como se lograron exitosamente los retratos holográficos en una convención de Tecnología (probablemente por primera vez en el mundo). Segundo, como los hologramas de objetos vegetales simples, visibles bajo la luz normal, se pueden usar para llevar la holografía a una audiencia mayor. Finalmente, como la colaboración entre técnicos y artistas puede conducir a productos altamente satisfactorios para ambas partes.

SOME HISTORY

Although the most productive manufacturer of holographic silver halide materials was based in the beginning in Belgium, nothing very spectacular happened in this country in the field of holography since its inception over 50 years ago apart from stopping the production around 1975, due to commercial considerations. Coming from a scientific background, I began making holograms in 1966; using holography mainly for technical applications, such as non-destructive testing and displacement measurements. I began to feel increasingly disappointed after working in the medium for a decade, because so few people knew about holography and what it could do, and because many ignored holography completely. As a scientist I have learned to be logical, and it seemed logical to me to do something about this situation. So I organised exhibitions and gave lectures, thinking that bringing holography out of the laboratory would suffice to provide the needed impetus. A couple of years and a number of exhibitions later, I had to admit that, although some improvement could be noted, a large portion of the population was still unaware of the existence of holography and its applications. I decided that more spectacular things would have to be done before people really noticed, and I realized that the continuous presence of holograms in normal life would also be of much interest. When things cease to be a mystery, they become common; people are not only more critical about common things, but also notice them more.

At about that time, rainbow holograms became familiar to the general public by their appearance on credit cards and in magazines.

As proud as holographers were to see these images gain worldwide recognition, it needs to be said that their image quality falls somewhat short of our hopes. Because of their mirrorized nature, the stickers reflect a great deal of background light into the image, making it sometimes difficult to see; thus the subject matter must be easily identifiable. The practical necessity that the hologram be visible in any light severely restricts the depth that can be used. Thus the design of images for these holograms has its own special set of aesthetics and the creation of these holograms presents its own technical challenges. I therefore decided that it would be more logical to work with reflection holograms (as they are more simple to reconstruct properly) and not in the second-generation mode but in the direct one-step Denisyuk mode, for reasons that will be explained shortly.

Although I did not intentionally develop a particular strategy, my work seemed to follow a natural sequence of public appearances in the year 1987 in Belgium. My portrait holography was shown during a technology fair; I collaborated with two artists on specific topics; and my project called *Herbarium Holographicum* was begun (this should continue for some time).

THE DENISYUK RECORDING SETUP

The in-line reflection recording scheme named after Denisyuk (1) is by far the simplest of the holographic schemes. It can be used for metrological and interferometrical purposes (in a piggyback setup (2-5) and for single-shot display applications. Apart from its simplicity, this setup where laser, sensitive material and object are almost in-line, is also very economical with light. The available energy is effectively used twice, and the viewing angle at reconstruction is very large, approaching 180° when the object is close to the hologram plane. Moreover, the distortions introduced are minimal; they are due to slope variations in the recording material (which are small if the relative humidity is between 40 % and 60 %) and to color discrepancies between reconstruction and recording. Normally, records are made with a ruby laser ($\lambda = 694,3$ nm) or a helium-neon laser ($\lambda = 632,8$ nm), while reconstruction is optimised (by processing) between 580 nm and 550 nm, which is optimum in respect to human eye sensitivity.

The main drawbacks of this recording setup are the extreme requirements that must be met by the sensitive materials and by its processing, and the fact that the ratio of object to reference beam intensity can be altered only by treating the object surface (e.g. by painting it). A variation on this technique will be presented later.

The lack of constraints in the building stage of this type of setup allows one to exercise all one's creativity without having to think about lenses and mirrors; on the other hand, from the artistic viewpoint, each recording is an original one. No copies are made, and each record can be signed as "orig".

PROCESSING

Phenomena involved in the processing of silver halide holograms still are not fully understood. Most holographers use photographic developers, and almost everyone has a favorite developer, chosen as a result of experience, with consideration for the temperature and humidity of a specific darkroom. True holographic developers, based on a well-considered hypothesis of holographic image formation, are not available. Probably there are some scientists who have much knowledge of this subject, but little information is given free, probably because of commercial interests.

The quality of holograms is generally described in terms of the diffraction efficiency, the signal-to-noise ratio, and resolution (6). But subjective factors also play an important role in the judgment of the result: color acceptability by the viewer, acceptability of small defects, optimal amount of light, contrast rendition, etc. At the moment, there is no measuring

standard; our experience is that viewers prefer wavelengths between 580 nm (a yellowish orange) and 530 nm (a not-so-yellowish green), the peak of the Gaussian distribution lying around 560 nm. Upon first viewing, the amount of light (the brightness of the image) is very important, but when people become accustomed to holograms, they pay more attention to contrast and resolution; a heavily reflecting background or flare (noise) is then perceived as a defect (7).

MAKING PORTRAITS AT A TECHNOLOGY FAIR

The first of my projects to bring holography to a large audience in Belgium was based upon an old idea, that of making holographic snapshots. These were feasible in principle, because the beam quality of ruby pulsed lasers reached a sufficiently high level. The Flanders Technology Fair was held from 10-16 May 1987 in new premises, and the first help came from the organisers, who gave me free use of an exhibition space, the stand itself, the photographic material and three engineers were put at my disposal by a Belgian manufacturer. In the small space available, I managed to build two darkrooms, one finishing room, one light-lock chamber and one general purpose area, where I explained the procedure to visitors and interested people. The subjects were illuminated by a strongly diverging beam (Figure 1); they were asked to focus on a green mercury vapor lamp placed about 0.5 m

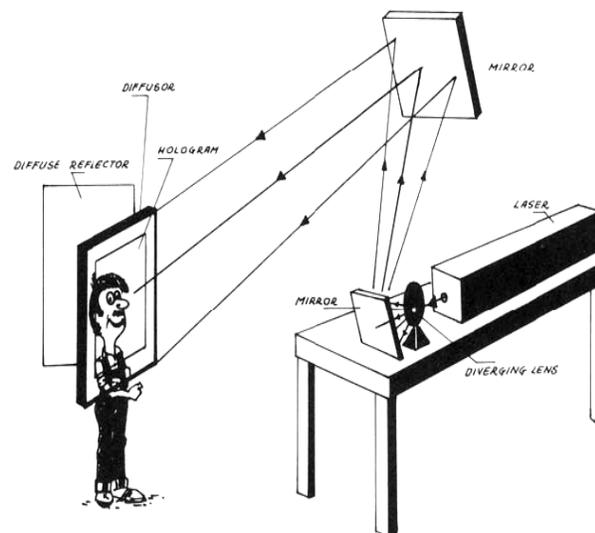


Figure 1. Setup used for marking portraits. A diffuser with a small scatter angle is introduced between the hologram and the subject.

away and about 30 cm out of the optical axis - this to avoid in the image the large pupil diameters that give a waxy look. An additional very weak diffusor was introduced between subject and hologram, for safety; it had a scatter angle smaller than the angle subtended by the reconstruction source but larger than the minimum angle that should be subtended by a laser source for accepting that source as broad (8). Some lateral diffuse reflectors completed the setup. The laser used was a ruby laser (9) giving an energy of 1 Joule per pulse in 25 ns at a wavelength of 694 nm. The coherence length was certified to be at least 1 m but generally was longer.

One of the main problems I encountered was dust. The stand was made out of plaster plates nailed to a wooden framework; it had been painted, but unprofessionally. Lenses and mirrors had to be cleaned before each recording. Processing was done by hand, as the temperature rose from about 17/C in the early morning to about 28/C at the end of the day. The diffraction efficiency seemed to be related to the density of the film after development, although these are basically quite different physical phenomena; the optimum lay around $D = 2.3$. In this case, the reconstruction wavelength was about 550 nm; it was generally shifted to pink during the final drying operation, which was carried out by a mechanical drier, the tank being filled with a solution of 5 g sorbitol per liter of distilled water. Backing was done by sticking a black plastic foil to the emulsion side with a professional laminator.

During the 6 days of the fair, approximately 120 portraits were taken; the mean duration of a full cycle (from recording to development to finishing and framing) was about 20 minutes with a crew of four; the shortest time was 12 minutes. It is not yet a Polaroidtype of instant holography, but I hope I have made a good step in the right direction; at least I showed that holography can be done in relatively harsh circumstances and at acceptable speed.

HERBARIUM HOLOGRAPHICUM

Almost nobody -not even the most enthusiastic hologram fanatic- has a hologram hung in the living room. Hologram exhibitions attract thousands of visitors, holography is a good conversation item and one finds rainbow stickers on magazines every month; but almost inevitably even a good reflection hologram ends its life in a drawer because few people like to see the black square hole on the wall when the hologram is not illuminated by a suitable halogen source. I therefore looked for a solution to this problem, trying to use relatively simple objects that would allow for reconstruction by ambient light; the objects needed to be recognizable by everybody and also pleasant to the eye, occasionally even beautiful.

I found that leaves of some trees and plants were very hologenic; so I started to make small numbered series of vegetal images. Those limited editions are marked HH for Herbarium Holographicum (10), followed by a series number and the total number of holograms shot from that subject. The Latin name of the plant and my signature complete the caption. At least one more authenticity clue is encoded in the holograms; details of that will only be given free after my death. The series are small (containing typically between 10 and 40 holograms), because the recording has to be made soon after harvesting the vegetal materials. As shown in Figure 2, such a hologram can be reconstructed with normal light; of course, the fine details and the deeper parts of the scene need a point-source type of reconstruction light.



Figure 2. *HH II 6/20 Ficus carica*, hologram, triacetate-based emulsion, 30 × 40 cm, 1988. Hologram of a leaf of a fig tree, reconstructed with neon-tube lighting.

As the objects involved in this project are rather small and stable, a much simpler setup using small continuous wave lasers can be used, provided one can eliminate movement between subject and hologram; in most cases, this also means avoiding the transfer of vibrations to the setup. As an example, Figure 3 shows the recording of such a hologram in the fifteenth-century vaulted brick cellar of my former country house. Typical exposure times on 8E75 film are 5 to 10 seconds with a small HeNe laser; as shown, the whole setup can be built on the floor.

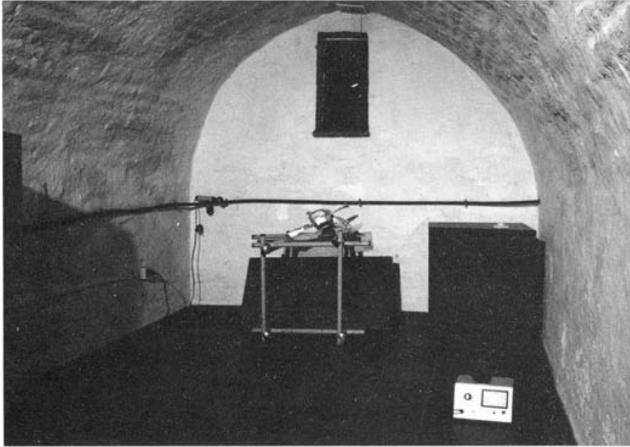


Figure 3. Practical setup for recording holograms of stable objects. The objects rest on the emulsion, which is supported by a Frame. The mirror reflects the light of the laser (not visible in the figure, as it is behind the camera used to photograph the scene) upwards: laser and frame are on the floor, as it is only the position of the hologram relative to the object that has to remain constant.

COLLABORATION WITH THE ARTISTIC COMMUNITY

A number of artists are interested in finding technical help for realizing some of their basic ideas with holography. I have collaborated with Julien De Groeve. This artist has a classical academic background and has been producing and exhibiting paintings and lithographs regularly since 1965. At one point, however, he felt increasingly disappointed about not being able to bring the third dimension to the public in these works, and he stopped production around 1980. We were brought into contact by a common acquaintance, talked a lot about the potential of holography; and began our collaboration early in 1984. It was only after 2 years of experiments that we produced our first really satisfying results, but the cooperation and especially the crossfertilisation taught us a lot.

Generally, De Groeve first produces a mixed-media sculpture, to ethereal and to fragile to last or even to be shown for long; this is called a morphogram. This piece is never shown to the public. A series of Denisyuk holograms is taken of the morphogram, which is then destroyed. In this way, the circle of illusion is complete. De Groeve claims that he sees his creatures (he calls them ghosts) even when he is sober. I make the holograms in a one-way Denisyuk fashion, so that the only tangible clue of the existence of these creatures is given by the resulting recording. Even the color is synthetic; most of the objects are silvered before recording. An example of this collaboration is shown in Figure 4.

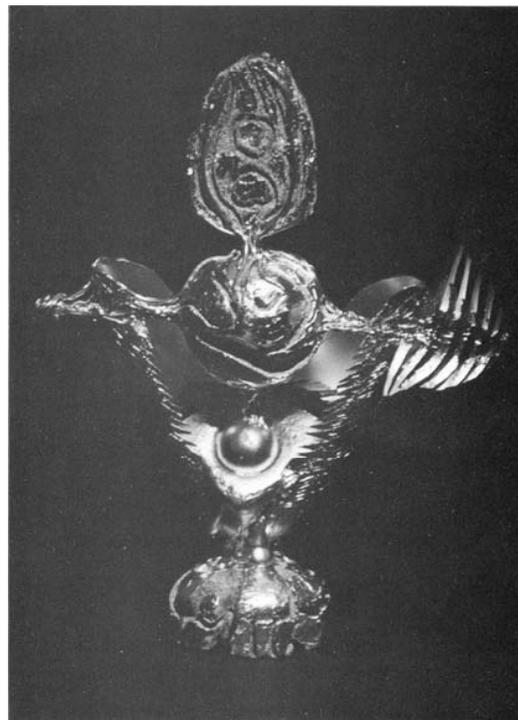


Figure 4. Hologram of *Creature of Rigel*, triacetate based photographic emulsion, 30 × 40 cm, 1987. The mixed-media object (morphogram) was made by Julien De Groeve specifically for recording holograms of it.

DISCUSSION AND CONCLUSIONS

Denisyuk reflection holograms produced in the setup described reconstruct in bright colors, have large viewing angles, and few if any cosmetic defects. I have tried (a) to interest people in holography by making holograms of a subject they are interested in; (b) to demystify and debanalise holography by presenting an everyday object in an almost natural fashion, showing that such things can be pleasant to the eye and even beautiful; (c) to collaborate with interested artists in such a way that both parties are enriched by the experiment and satisfied with the result.

Although doing all this is a lot of fun, not least because of the people one learns to know, I will probably return to my old love, the purely mechanical applications of holography, once a generation is persuaded that holography not only exists but also can be of practical importance. But before this goal is achieved, a lot of work remains to be done. Even if the goal is achieved, I hope that the fruitful discussions and the cross-fertilisation of different approaches by various holography users will continue; it certainly was, probably is and I hope will be one of the lasting bridges between science and art, I believe that this will be true even when holography will have turned like electricity, the telephone, radio and television from a technical curiosity to an irreplaceable part of daily life.

ACKNOWLEDGMENTS

The work reported here was supported by the Belgian National Foundation for Scientific Research through grants 29000878, 2001275 and 2004486,

and I also gratefully acknowledge the personal grant placed at my disposal by the same foundation. The technical skills and the fruitful discussions with Ludo Joly, Maurice De Caluwé, Paul Jacobs and Frank Mortier were of invaluable help.

REFERENCES AND NOTES

1. DENISYUK, Y. (1962): "Photographic Reconstruction of the Optical Properties of an Object in its Own Scanned Field", **Soviet Physics Doklady** 7, 543-545.
2. BOONE, P. (1970): "Toepassingen van koherent licht in de vervormingsanalyse", Ph. D.Diss, University of Gent.
3. _____ (1974): "The Use of Reflection Holograms in Holographic Interferometry", **Proceedings of 1974 IEEE International Optical Computing Conference**, Zürich.
4. _____ (1975): "Use of Reflection Holograms in Holographic Interferometry and Speckle Correlation Techniques for Measurement of Surface Displacement", **Optica Acta** 22(7), 579-589.
5. NEUMANN, D.B. and R.C. PENN (1974): "Object Motion Compensation using Reflection Holography", **Journal of the Optical Society of America** 62, 1373.
6. BOONE, P. (1985): "Some Problems Associated with Processing Agfa Gevaert 8E75HD Sheet Film for Reflection Holography", **Progress in Holographic Applications**, Society of Photographical Industrials and Engineers 600, 172-177.
7. At present I use Metol ascorbid acid superadditive developer. Ascorbic acid as a developing agent was first studied by Kendall (1935); it was brought to my attention by J. Gutjahr of the Photographische Fachhochschule Köln, Germany. See also the MAA3 developer of Benton. I use baths of very simple formulation (see L. Joly and R. Van Hoorebeeck, "Development Effects in White Light Reflection Holography", *Photographic Science and Engineering* 24, 1980, pp. 108-113, and a Kodak R9 type of bleach (see *Kodak Plates and Films for Scientific Photography* (Eastman Kodak, 1973, pp. 17-23). This has the advantage that acceptable quality is produced consistently; other developments schemes involving very rapid developers and/or rehalogenating bleaches can give better results in terms of diffraction efficiency but normally are accompanied by a higher flare and are also more prone to variations in result because of intrabatch differences in the emulsions and/or the age of the material.
8. SLIMEY, D. and M. WOLBARSHT (1980): "Safety with Lasers and Other Optical Sources", New York : Plenum Press, 261 ff. see figs 8-10 in this book.
9. An HLS2-Ruby Laser made by Lumonics (formerly JK Lasers).
10. The name Herbarium Holographicum and the initials HH are registered.

EFECTOS DE LA ABLACIÓN SELECTIVA CON LÁSER EN EL DESESPINADO DE NOPAL

L. Ponce, T. Flores y M. Arronte
CICATA-IPN, Altamira, Tamps, México
ICTM-Universidad de La Habana, Ciudad de La Habana, Cuba

RESUMEN

Se presentan los resultados de la ablación con láser pulsado como nuevo método para realizar la eliminación de espinas. La nueva técnica basa su funcionamiento en la absorción selectiva de la luz láser en las espinas. Los parámetros del láser más favorables para realizar el desespinado fueron obtenidos sobre la base del estudio de propiedades ópticas tanto de la espina, como de la hoja. Fue demostrado que el empleo de la fotoacústica permite controlar el desespinado en tiempo real, determinando los resultados de la limpieza durante el proceso. Los resultados obtenidos demuestran que la eliminación de espina, puede hacerse con mínima afectación del producto y con ventaja en varios aspectos respecto a los métodos tradicionales.

ABSTRACT

Pulse laser ablation as a new method for thorn elimination is presented. The new technique can work thanks to the use of pulsed light which is absorbed in a selective way, specifically in the thorns. An optical characterization of both thorn and cactus leave after and before irradiation, permits to find most convenient laser parameters as wavelength, pulse length and energy. By laser photoacoustic technique it is possible to monitoring the process in real time, checking online the cleaning results. The feasibility of performing the selective laser ablation of thorns with advantages over traditional methods was proved.

1. INTRODUCCIÓN

El desespinado de Nopal se realiza actualmente mediante cuchillas, ya sea de forma manual o automatizada [1]. En ambos casos el proceso presenta graves problemas asociados a la merma considerable del producto de hasta de un 30 %, la baja productividad, la disminución de la vida de anaquel y la calidad del producto, así como problemas sanitarios y de afectación a la salud de los operarios. Estos problemas han causado que el desespinado se considere un cuello de botella en la cadena productiva del Nopal, que de hecho limita la posibilidad de realizar la exportación del producto como verdura.

Por otra parte, el Nopal es un producto de demanda creciente a nivel internacional, con cualidades muy beneficiosas para el consumo humano [2]. La solución de los problemas que hoy afectan su cadena productiva, podrían significar un aporte muy importante para el desarrollo de esta industria.

A partir de estos elementos, en el trabajo se propone una solución radicalmente diferente a las que se han utilizado hasta ahora: utilizar luz láser para realizar el desespinado. La idea consiste en utilizar el principio de absorción selectiva, que en principio es posible implementar cuando se utiliza luz de un determinado segmento del espectro, escogiendo la longitud de onda de forma que esta se

absorba fuertemente en el elemento que se desea eliminar y en cambio se absorba de forma mínima en el sustrato que se desea preservar.

2. EXPERIMENTOS

2.1 Mediciones de Reflectancia

Se realizaron mediciones de la reflectancia tanto de la zona de la penca sin espinas, como alrededor de ésta, en la zona oscura que rodea la espina (peciolo), para dos variedades: Villanueva y Jalpa.

En la Figura 1 se observan los resultados para la medición de reflectancia para la zona de la espina y la corteza de la penca para la variedad Villanueva.

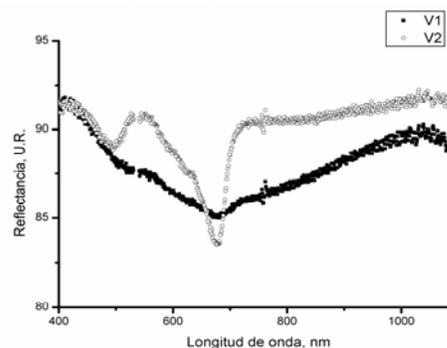


Figura 1. Reflectancia del Nopal Variedad Villanueva:
V1 - Zona correspondiente a espina,
V2 - Zona de la corteza.

En la gráfica se puede apreciar que en casi todo el espectro la reflectancia es menor en la zona de coloración oscura que rodea la espina, exceptuando la región entre 650 y 700 nm. El resultado para esta última región se explica por la absorción de la clorofila, muy fuerte en la corteza.

En la Figura 2, se aprecia un gráfico de absorción obtenido en la zona verde de la corteza para una muestra de la misma variedad. Se confirma el comportamiento de la reflectancia obtenido en el experimento anterior: Fuerte absorción en la zona del ultravioleta, una banda de absorción intensa entre 650 y 700 nm y una región donde la absorción es mínima y que podemos ubicar entre los 800 y 1100 nm. Esta sería la región donde se podría trabajar para eliminar la espina sin afectación a la penca garantizando la máxima absorción en la espina para favorecer la productividad del desespinado y mínima absorción en la corteza con el fin de evitar daños.

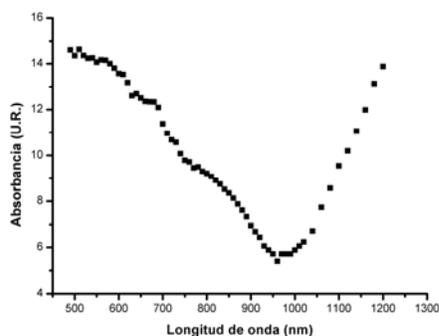


Figura 2. Espectro de absorbancia de la corteza.

2.2. Experimentos de desespinado láser

Los experimentos se realizaron utilizando láseres pulsados de Nd:YAG que poseen parámetros apropiados para realizar la ablación de material con mínima afectación a la profundidad del sustrato. Como se ha demostrado ampliamente [3,4], cuando se trabaja este tipo de láser en régimen de pulsos cortos, la penetración de la radiación no sobrepasa las decenas de micras y la propagación de calor al interior del objeto es mínima. En la tabla 1 aparecen los parámetros de los láseres utilizados:

Tabla 1. Parámetros de los láseres empleados en los experimentos de desespinado.

Modelo	Energía de pulso (J)	Duración de pulso
GOS-1001	500	1 ms
PLC-CUT	0.3	180 μs
Lumonics HY-1200	0.2	10 ns

El experimento consistió en irradiar con pulsos láser la superficie de la penca en ambas zonas, con y sin espinas. En la Figura 3 se observa el esquema experimental utilizado.

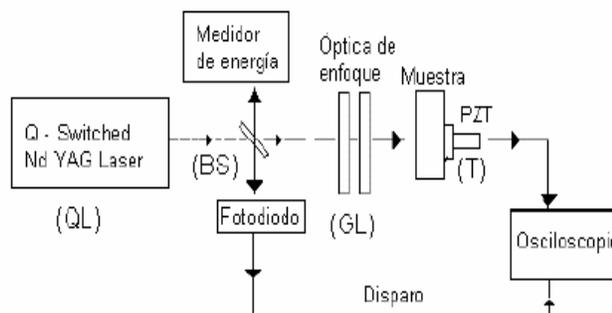


Figura 3. Diagrama del sistema empleado para realizar el desespinado de Nopal. (QL) láser Nd: YAG, (BS) divisor de haz, (GL) óptica de enfoque, (T) transductor PZT.

Como se ha señalado anteriormente, se utilizaron varios láseres, que en el esquema se colocaron en todos los casos en el lugar señalado para el láser de Nd:YAG. Una pequeña porción del pulso (1% de la energía total), era derivada para realizar la medición de energía en un medidor de energía y potencia láser modelo LM-09. El haz láser se colima mediante una lente positiva de 2.54 cm de diámetro y distancia focal de 5 cm para lograr un diámetro del haz en la zona de irradiación de 4 mm. Las señales acústicas fueron detectadas con un transductor piezoeléctrico V310 Panametrics de 5.0 MHz. La señal producida por el transductor fue registrada y almacenada en un Osciloscopio de 500 MHz Textronic TDS 210.

Con el sistema descrito anteriormente se asegura que la zona irradiada tenga siempre un área de 4 mm y una densidad de energía fija. El procedimiento experimental fue el siguiente: Se aplica un primer pulso en la zona de la espina, se registra la señal fotoacústica y se revisa visualmente si se ha producido plasma. Luego, se mueve la muestra 3 mm y se repite el experimento en toda el área de la penca, incluyendo la zona sin espinas.

Con esta serie de pasos se encuentra el umbral de energía necesario para producir una absorción intensa en la espina y prácticamente nula en la zona sin espinas.

Los experimentos se realizaron con los tres láseres mencionados, lo que permitió barrer el ancho de pulso y la energía de éstos en una amplia gama: la energía de pulso desde 0.01 J hasta 500 J por pulso. La duración de pulso en 3 niveles: 10 ns, 180 μs y 1 ms.

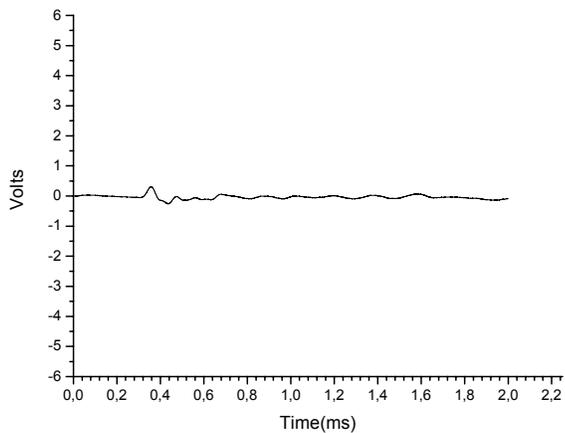


Figura 4a. Señal acústica capturada en la zona de la corteza.

En la Figura 4a se observa el oscilograma de la señal acústica obtenida al irradiar la zona de la corteza sin espinas. Se observa una señal de muy baja intensidad relativa. Tal y como se mostró en los análisis de reflectancia, la absorbancia en esta zona es muy reducida y por tanto no se produce plasma ni se genera onda acústica asociada a la ruptura y ablación de material.

La gráfica de la Figura 4b corresponde a la señal acústica obtenida en las mismas condiciones que la anterior, pero al irradiar sobre una espina. Se observa una señal acústica muy intensa y característica. En este caso se observa visualmente la formación de plasma y la extracción de material.

A continuación, se determinó la cantidad de pulsos y energía total, necesarios para eliminar una espina. En este experimento se aplicaron pulsos repetidos, con una frecuencia de 10 Hz. Se encontró que, como promedio, a los 15-16 pulsos se había eliminado completamente la espina y atenuado totalmente la señal acústica, lo cual indicaba que ya no se estaba produciendo absorción.

En la Figura 5 se grafica la variación de la amplitud de la señal acústica según el número de pulsos aplicados. Se observa un aumento rápido de la intensidad de la señal acústica hasta alcanzar un máximo, seguido de una disminución hasta la total desaparición.

El aumento en la amplitud de la señal, puede explicarse debido a que la absorción aumenta después de una ruptura inicial hasta llegar a un valor máximo. En esta etapa se está produciendo la ablación del material de la espina y la zona adyacente. A medida que la presencia de material absorbente va disminuyendo, también disminuye la intensidad de la señal acústica y de hecho la intensidad del plasma. Este proceso continúa hasta que desaparece completamente la absorción y por tanto desaparecen también la señal acústica y el plasma.

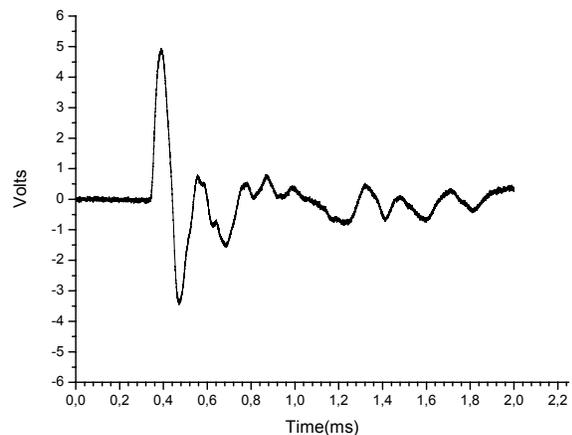


Figura 4b. Señal acústica capturada en la zona de la espina.

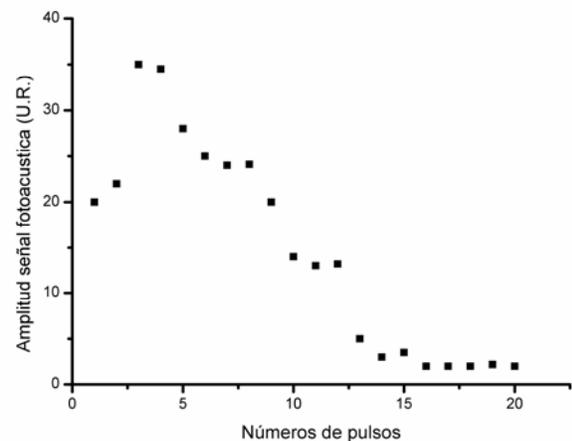


Figura 5. Dependencia de la señal acústica con el número de pulsos.

Como criterios para determinar el láser y los parámetros más apropiados se escogieron lograr la máxima velocidad de desespinado y afectar al mínimo la corteza. En resumen, se logra la eliminación de la espina y la zona adyacente con los siguientes parámetros: Energía de pulso de 0.3 J, área de irradiación de 0.5 cm², duración de pulso de 180 μs y frecuencia de 10 Hz.

2.3 Microscopia Óptica

Las mediciones se realizaron utilizando una cámara digital y un microscopio digital acoplado a una computadora. En la Figura 6 se observa el efecto del desespinado manual (la fotografía fue tomada sin aumento). Se aprecia como esta acción elimina una zona de la corteza que rodea la espina, dejando sin protección la penca y produciéndose la salida de mucílago, con el consiguiente efecto oxidante a corto plazo. Los nopales desespinaados de esta forma tienen una vida útil de unas pocas horas antes de oxidarse completamente.

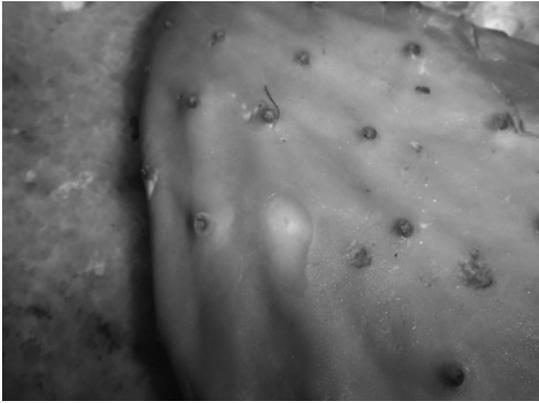


Figura 6. Efecto del desespinado mecánico.

En las Figuras 7a y 7b se puede observar una vista al microscopio con aumento 10X, de una espina antes y después de ser eliminada por el láser. Se aprecia como la absorción se ha producido preferentemente en la zona del que bordea la espina, provocando la caída de ésta.

En la Figura 8 se observa una imagen al microscopio con aumento de 60x, de la zona del cráter resultante después de realizada la eliminación de la espina. No se observan daños morfológicos, no se detecta salida de mucílago y el fondo del cráter tiene un aspecto limpio y sin restos de espina o peciolo.

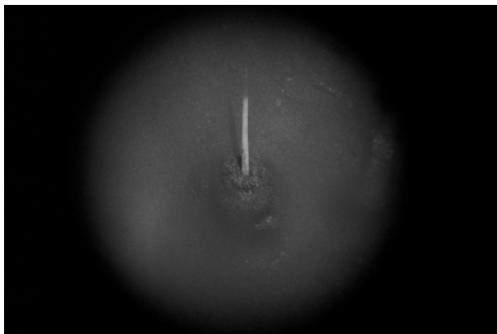


Figura 7a. Espina antes de irradiar.

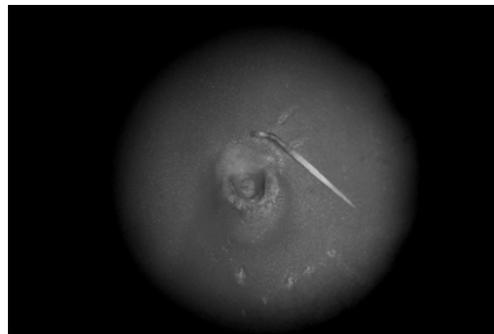


Figura 7b. Efecto después de irradiar con el láser.



Figura 8a. Vista de un cráter cuya espina fue eliminada con láser, en la zona lateral del Nopal.



Figura 8b. Vista al microscopio del cráter resultante después de realizado el desespinado con láser.

3. RESULTADOS

De acuerdo a los resultados del trabajo, la eliminación de espinas de nopal con láser de pulsos de Nd:YAG ofrece las siguientes ventajas:

- Eliminación completa de la espina sin afectar el producto.
- No hay contacto mecánico, disminuye la manipulación.
- Se elimina la salida de mucílago.
- Disminuye drásticamente la merma.
- Automatización.
- Se elimina la afectación a la salud del operario.

A partir de la comprobación realizada, resulta posible proponer la construcción de una máquina basada en un láser de Nd:YAG, con régimen de generación libre y capaz de trabajar en altas frecuencias de repetición para lograr la mayor productividad posible.

En esencia, la máquina en principio estaría compuesta por una estera que desplazaría los nopales a velocidad programada, mientras el láser mediante un sistema de barrido automatizado del

haz irradiaría el nopal completamente, deteniéndose en las espinas a partir de una señal acústica de aviso que indicaría la presencia de éstas y su posterior eliminación.

CONCLUSIONES

Se logró establecer el método de ablación selectiva mediante láser pulsado, como principio para desarrollar una nueva técnica de desespinado

de Nopal, demostrándose sus ventajas respecto a los métodos actuales. Se obtuvieron los parámetros láser para el desespinado, los cuales indican que con pulsos en régimen de generación libre y energías entre 0.3 y 1.5 J se pueden eliminar las espinas sin afectar visiblemente la corteza. La nueva tecnología ofrece una alternativa tecnológica viable para resolver el problema del desespinado de nopal y en principio podría ser aplicada en otros productos.

REFERENCIAS

1. BARRIENTOS, G.; I. MORALES; M. GARCÍA and A. ZEPEDA (2003): Proceedings of IX National Congress and VII Internacional Congreso of Nopal Knowledge and Processing, 183, University of Chapingo.
2. CÁRDENAS, M.; S. SERNA and J. VELASCO (2003): **Arch. Latinoam. Nutrición**, 48(4), 316-323.
3. MIOTELLO, A. and R. NELLY (1995): **Appl. Phys. Lett**, 76, 3535, p. 1706.
4. VON der LINDE, D. and H. SCHULLER (1996): **J. Opt. Soc. Am. B** 13, p. 216.

ESPECTROFOTOMETRÍA DE LA LÍNEA DE COLORES ISAOL Y SU COMPARACIÓN CON REGISTRO DIGITAL

Beatriz Moreno, Instituto Superior de Arte, Habana, Cuba

Marisa Martínez, Universidad Politécnica de Valencia. España

Trabajo realizado en la Facultad de Bellas Artes de la Universidad Politécnica de Valencia, España

RESUMEN

Se realizó la caracterización por espectrofotometría de la línea de colores ISAOL, que produce el Instituto Superior de Arte de La Habana, comparándola con la medición por registro digital. Sobre un lienzo con preparación comercial, se aplicaron los colores en estudio y se determinaron los espectros por reflexión y las coordenadas $L^*a^*b^*$. El lienzo se escaneó y se registró por fotografía digital, y se obtuvieron las coordenadas de color en ambas imágenes. Se compararon los valores obtenidos por espectrofotometría y los dados por las dos imágenes. Se obtuvo que el color de una superficie se puede medir aproximadamente, usando estos medios de registro digital. Sin embargo para medir pequeñas diferencias de color los errores fueron considerables, por lo que su uso no se aconseja en tal circunstancia.

Palabras clave: colores ISAOL, colorimetría, espectrofotometría, registro digital.

ABSTRACT

In this paper are described the results of the characterization by spectrophotometry and the colorimetric coordinates $L^*a^*b^*$ of ISAOL color paintings, produced at the Higher Institute of Arts in Havana. A test probe was prepared with commercial primed canvas, and was painted with the studied colors. Reflection spectra and colorimetric coordinates $L^*a^*b^*$ were obtained. The canvas was scanned and registered by a digital camera. Values obtained with the spectrophotometer were compared with the results from the digitalized images. It was obtained that it is possible, within certain limits of accuracy, to use the digitalized images to measure color. A proof was made in order to measure little differences of color, and errors were considerable.

INTRODUCCIÓN

La línea de colores ISAOL que produce el Instituto Superior de Arte de Cuba había sido estudiada desde el punto de vista de su resistencia a diferentes agentes agresivos. No obstante, no se había realizado un estudio espectrofotométrico por reflexión. Luego, ese es el primer objetivo de este trabajo, caracterizar por espectrofotometría la línea de colores ISAOL.

El registro de las imágenes en todas las instituciones culturales del país, se realiza por medio de la fotografía, tanto analógica como digital, y en algunos casos del escáner. Teniendo en cuenta la importancia que tiene para la restauración el conocimiento del color exacto de una pieza, resulta necesario determinar el grado de exactitud de registro del color de los equipos utilizados. Por ejemplo, en caso de un accidente (digamos, un incendio pequeño en el almacén de un museo) puede surgir un faltante importante en una obra pictórica. Si se va a los archivos digitales, a buscar el color cuantificado en una imagen, el valor registrado puede tener errores. Por estos motivos, se diseñó y aplicó una prueba para comparar los resultados del registro digital con el de un instrumento preciso como el espectrofotómetro, constituyendo este problema el segundo objetivo del trabajo.

El tercer aspecto analizado fue la posibilidad de medir diferencias pequeñas de color con el escáner y la fotografía. La variación del color en el tiempo, así como su afectación ante diferentes agentes de deterioro, o procedimientos de restauración, es un problema importante que es preciso controlar (1).

Acerca de la cuantificación del color

Todo color se puede definir mediante tres cantidades, que varían según el sistema empleado. La medición de un color se realiza a partir de su composición sobre la base de tres primarios que se mezclan en forma aditiva. Pueden elegirse diversos conjuntos de tres primarios, que deben tener ciertas propiedades, pero se han definido tres funciones conocidas como curvas triestimulares de color que son las usadas habitualmente para este fin. Conociendo el espectro de una radiación determinada, es posible conocer su composición en función de estas curvas triestimulares. De ahí surgen los llamados coeficientes tricromáticos. Una vez que se conocen estos últimos, mediante ecuaciones de transformación de un espacio tridimensional a otro, se pueden calcular los tres valores que caracterizan a un color en cualquiera de los sistemas.

En este estudio se utilizó el CIE $L^*a^*b^*$ porque es el que mejor refleja las diferencias de color en función de la percepción del ser humano y medir

diferencias es precisamente uno de los objetivos. En estas coordenadas, L^* significa la luminosidad del color y va de cero a cien, a^* es una escala perpendicular a la anterior que corre desde el verde (-60) hasta el rojo (+60) y b^* , perpendicular a las dos escalas anteriores, corre desde el azul (-60) hasta el amarillo (+60). De esta forma se define un sólido en el cual están contenidos todos los colores. La obtención de estos valores numéricos es un problema que resuelve el ordenador acoplado al espectrofotómetro, tomando como base los resultados del espectro obtenido y las curvas triestimulares de color para el cálculo de los coeficientes tricromáticos. Luego, aplicando las ecuaciones de transformación entre los diferentes espacios tridimensionales que caracterizan a las mediciones de color, se puede pasar de un sistema a otro (2).

Acerca del equipamiento y probeta utilizados

El equipo con el cual se realizaron las mediciones que consideramos verdaderas fue el espectrofotómetro MINOLTA CM-5031. Se trata de un espectrofotómetro por reflexión, con esfera integradora. El mismo trabaja con una lámpara de arco de Xenón pulsante y posee una matriz de fotodiodos de silicio con matriz de filtros espectrales. Trabaja en el rango visible, (400 a 700 nm) y promedia el valor en un área circular de 4 mm de diámetro. Este equipo da los valores colorimétricos en varios sistemas, nosotros trabajamos en el sistema $L^*a^*b^*$. Es de señalar que tiene una desviación estándar ΔE^* (integra los tres parámetros) igual a 0,06 y que había sido calibrado un mes atrás. El escáner utilizado fue un ACER SCAN PRISA 124 y la cámara digital fue el modelo No. C-4 de la OLYMPUS Opt. Co. LTD 5AP.

Los colores de la línea ISAOL estudiados fueron los siguientes: Blanco Titanio, Amarillo Permanente, Rojo Cadmio Claro, Azul Ftalo, Verde Brillante y Sombra cruda, tanto concentrados como diluidos.

Se preparó una probeta de trabajo sobre un lienzo con preparación comercial. La tela se dividió en dos secciones. En una parte, en seis rectángulos aproximadamente iguales de 2 por 3 centímetros, se pintó con los colores puros, y dando varias capas. En la otra, con idéntica geometría, e igual número de capas, se dispusieron los mismos colores diluidos, buscando una proporción semejante en todos los casos. Para ello se mezclaron 0,1 g de cada color (pesada la cantidad en una balanza PRECISA XT 120) con 400 μ l de aguarracina. El lienzo se dejó secar durante una semana en condiciones de laboratorio.

Una vez seca la muestra, se midieron todos los colores, concentrados y diluidos, con el espectrofotómetro, en tres puntos diferentes de cada rectángulo, para ser promediados, y se les obtuvo el espectro en un punto representativo. Acto seguido,

se registró la imagen con el escáner y la fotografía digital. Esta última se tomó a la hora del mediodía, colocando el plano de la probeta a 45 grados aproximadamente respecto a la incidencia de los rayos solares, y tomando la foto perpendicularmente, un día despejado.

Los colores en las imágenes digitalizadas se determinaron tomando tres mediciones de cada uno y promediando.

Caracterización de la línea de colores ISAOL estudiada

En la Tabla I se presentan los valores de las coordenadas CIE medidas con el espectrofotómetro.

Tabla I. Coordenadas CIE de los colores ISAOL.

Color	L^*	a^*	b^*
Blanco Titanio	97,66	-1,25	1,48
Rojo Cadmio Claro	44,50	56,54	38,43
Amarillo Permanente	81,48	13,73	92,11
Verde Brillante	26,69	- 0,99	-1,31
Azul Ftalo	22,90	6,74	-19,65
Sombra Cruda	26,47	0,64	2,08

En las Figuras 1 y 2 se muestran dos de los espectros obtenidos por reflexión en la pintura concentrada. La 1 muestra el Rojo Cadmio Claro con reflectancia casi nula hasta los 580 nm en donde asciende rápidamente. La 2 muestra el Blanco Titanio. Se observan en este último caso, los excelentes valores de reflectancia en casi todo el espectro visible. Este color, confeccionado con Rutilo, cuando se compara con la gráfica reportada en (3) se observa que nuestro Blanco Titanio tiene una disminución de 2-3 % de la reflectancia espectral para casi todas las longitudes de onda del espectro, con excepción de la zona de los violetas, en donde la diferencia es más notable (30 %)

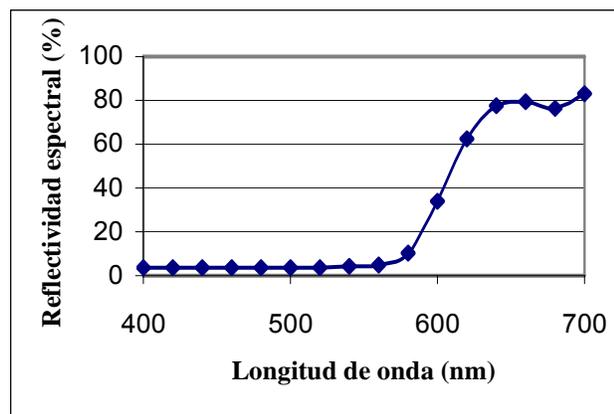


Figura 1. Espectro por reflexión de Rojo Cadmio Claro.

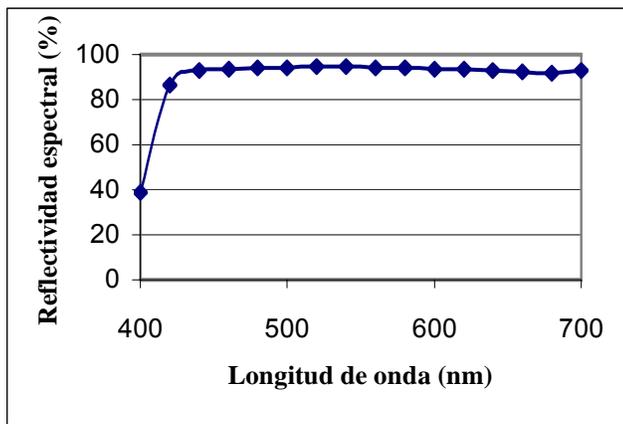


Figura 2. Espectro por reflexión del Blanco Titanio.

Comparación de los diferentes medios de registro

Se midieron mediante el programa Adobe Photo Shop las magnitudes $L^*a^*b^*$ del conjunto de colores registrada digitalmente. Como cada color es caracterizado por los tres valores, la semejanza entre dos sistemas de medición para todos los colores estudiados debe tener en cuenta simultáneamente los tres índices colorimétricos. No se hace nada comparando las coordenadas por separado. Luego, una medida integradora de la aproximación de un sistema de medición al otro debe ser la pendiente e intercepto de una recta en un gráfico, poniendo todos los parámetros de un sistema en el eje de las abscisas y todos los del otro sistema en el eje de las ordenadas, amén de la correlación con la posible recta resultante. De obtenerse una recta de pendiente unitaria, correlación cercana a uno e intercepto cero, es evidente que los sistemas de medición son compatibles. Y asumiendo que el espectrofotómetro es el más confiable de todos, podemos valorar los resultados con los otros medios de registro. Estos parámetros tienen la bondad de ser sencillos y comprensibles para todos. En la Tabla II se muestran los valores que permiten aquilatar de manera integral la bondad de estas mediciones.

Tabla II. Comparación entre las mediciones absolutas del espectrofotómetro y los medios de registro digital de imágenes.

Espectrofotómetro-escáner				
Pendiente	Error	Intercepto	Error	Correlación
0,94	0,09	1,3	4	0,93
Espectrofotómetro-fotografía digital				
Pendiente	Error	Intercepto	Error	Correlación
0,89	0,09	4,7	4	0,92

Para hacer una valoración de hasta qué punto se pueden medir diferencias pequeñas de color, se hizo el mismo razonamiento tomando como datos las variaciones de color con el espectrofotómetro comparadas con las mismas diferencias del escáner y las ídem de la fotografía digital. En la Tabla III se muestran las diferencias acusadas por el espectrofotómetro para las pinturas concentradas y diluidas. Fueron calculadas en coordenadas $L^*a^*b^*$ por la expresión pitagórica:

$$\Delta E = [(\Delta L^*)^2 + (\Delta a^*)^2 + (\Delta b^*)^2]^{1/2} \quad (1)$$

Tabla III. Diferencias de color Δe entre las pinturas concentradas y diluidas.

Blanco Titanio	2,91	Verde Brillante	20,02
Rojo Cadmio Claro	11,52	Azul Ftalo	17,12
Amarillo Permanente	9,66	Sombra Cruda	13,11

Se observa que los ΔE resultantes son valores mucho mayores en comparación con la desviación estándar 0,06 que reporta el fabricante para su equipo. Por lo tanto, no se puede afirmar que se está trabajando en el límite de sensibilidad. Señalemos además que las diferencias son notables a simple vista y distinguibles para las posibilidades de la impresora. Además, se corresponden con los órdenes de magnitud de diferencias de color a medir típicas de la literatura (3). Las correlaciones obtenidas para estos casos se dan la Tabla IV.

Tabla IV. Correlación entre las mediciones de diferencias medidas por el espectrofotómetro y las medidas por el registro digital.

Métodos Comparados	Correlaciones
Espectrofotómetro-Escáner	0,43
Espectrofotómetro-Fotografía Digital	0,40

DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

Primero que todo, se obtuvieron los espectros por reflexión de una línea ISAOL de pinturas. Además se obtuvieron las coordenadas $L^*a^*b^*$ de las mismas. Este es un aspecto importante de toda pintura, puesto gracias a este trabajo a disposición del productor y los consumidores.

Para discutir la comparación entre los métodos de medición empleados, es conveniente advertir que se trata de una situación válida para los equipos que estaban a nuestro alcance y que no se pueden generalizar estos resultados arbitrariamente a cualquier medio de registro digital.

Se observa de los resultados de la Tabla II que existe una correlación aceptable en la medición de color por medio del espectrofotómetro tanto con el escáner como con la fotografía digital. También la pendiente es cercana a 1 y el intercepto cercano a cero (teniendo en cuenta el rango de los valores involucrados). Esto significa, que para un conjunto de fines no con muchas exigencias, se pueden estimar los valores de las coordenadas de color a partir de estos económicos y accesibles medios de registro. No obstante, nada más de observar las correlaciones obtenidas en la Tabla IV para el caso de las diferencias de color, se ve que no es posible

proponerse medir estas magnitudes con estos equipos de registro digital. Es evidente que se introducen elevados errores.

Los parámetros para dilucidar estos resultados son muy sencillos de entender para los no especialistas.

AGRADECIMIENTOS

A las autoridades de la Universidad Politécnica de Valencia, en particular a las del Departamento de Conservación y Restauración de Bienes Culturales, por haberme permitido realizar estas mediciones allí.

REFERENCIAS

1. SAUNDERS, D.; H. CHAHINE, H. and J. CUPPIT (1996): "Long-term Colour Change Measurement: Some Results after Twenty Years". **Natl. Gallery Technical Bulletin** 17.
2. WATT, ALAN (1989): "Fundamentals of three dimensional computer graphics". Addison Wesley Publishers Ltd.
3. MAYER, RALPH (1993): "Materiales y Técnicas del Arte" Ed. Turse Hermann Blume, Madrid.

LOW-ENERGY ROTATIONAL EXCITATION OF H₂ AND N₂ BY POSITRON IMPACT. I - COMPUTED PARTIAL CROSS SECTIONS

J. A. Sabin del Valle¹, Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Ciudad de La Habana, Cuba

S. Telega², Faculty of Applied Physics and Mathematics, Technical University of Gdansk, Poland

F.A. Gianturco^{*3}

^{1,2,3}Department of Chemistry and INFM, University of Rome "La Sapienza", Rome, Italy

ABSTRACT

Low-energy collisional excitation of rotations in H₂ and N₂ by impact with slow positrons in the gas phase is considered by carrying out a Space-Frame (SF) dynamical calculation at energies well below the positronium formation threshold.

RESUMEN

Se consideran excitaciones por colisiones de baja energía de rotaciones en H₂ y en N₂ por impacto con positrones lentos en la fase gaseosa llevándose a cabo un cálculo dinámico en el sistema de referencia espacial a energías bien por debajo del umbral de formación del positronium.

I. INTRODUCTION

The experimental and computational study of low-energy positron scattering from molecular gases, both diatomic species and polyatomic targets, has a relatively long history which is chiefly related to the fundamental interest in the consequences of positron annihilation in gases and in the effects of slowing down positron beams in several media of applied relevance [1-3].

One of the complications created by the use of antiparticles in low-energy processes is the existence of additional channels which are not present in the case of electron beams. Thus, we know of the possibility of forming the positronium (Ps) compound, that adds a distinct 'reactive' channel to the theoretical description of the above processes [1], or that the particle-antiparticle decay channel, whereby the pick off by the positron of a bound electron leads to the emission of 2 or 3 γ photons, can leave molecular cations within the gas and therefore strongly modify the collisional process. In the present study, however, we shall limit our analysis to collision energies where the above channels are either closed or contribute very little to the overall collisional event, thereby focussing our theoretical and computational discussion to the direct excitation of molecular rotational degrees of freedom by low-energy scattering with positrons in simple molecular gases.

II. THE SPACE-FRAME DYNAMICS

In the present calculations we shall treat the N₂ and H₂ molecular targets as rigid rotors, disregarding from the time being the effects of vibrational excitations during the rotational energy transfer collisions. Furthermore, as reported in the following Section, the interaction with the molecules will be described by a local, energy-independent effective potential between the impinging particle and each rotating target. The total scattering wavefunction can be expanded in terms of asymptotic target rotational states that, for the title molecules, are simple spherical rotors

$$H_{\text{rot}}(\hat{R}_{\text{eq}})Y_{jmj}(\hat{R}_{\text{eq}}) = \frac{\hbar^2}{2I}j(j+1)Y_{jmj}(\hat{R}_{\text{eq}}) \quad (1)$$

with I being the isolated molecule moment of inertia [4] and \hat{R}_{eq} the space orientation of the molecular bond, kept at its equilibrium value. Hence, the total scattering wave function is given as

$$\Psi_n(E, r_p, R_{\text{eq}}) = \sum_f u_{i \rightarrow f}(r_p, E)r_p^{-1}Y_f(\hat{R}_{\text{eq}}) \quad (2)$$

where $|f\rangle$ denotes the $|j'm_j\rangle$ final states of the molecule involved in the expansion and the $u_{i \rightarrow f}(r_p, E)$ are the channel components of the scattering wavefunction, to be determined by solving the usual Schrödinger equation subject to its

scattering boundary conditions. Here the scalar r_p is the scattered positron variable position from the molecular center of mass (c.o.m.)

$$u_{i \rightarrow f}(r_p) \rightarrow \delta_{if} h^{(-)}(r_p) - (k_i / k_f) S_{if} h^{(+)}(r_p) \text{ as } r_p \sim \infty \quad (3)$$

$h^{\pm}(r_p)$ is a pair or linearly independent free partial solutions. When they are chosen to be appropriate Riccati-Hankel functions, then the S_{if} coefficients become the elements of the reduced scattering matrix, often additionally labelled by the total angular momentum of the system: $J = j + l$, the latter l being the continuum electron partialwave component.

The $u_{i \rightarrow f}$ are in turn expanded in products of total angular momentum eigenfunctions and of radial functions $\phi_{\lambda\lambda'}^J(E, r_p)$, where J is the magnitude of the angular momentum and, $\lambda' = (j', l')$. The radial functions are in turn solutions of the familiar set of coupled, second order homogeneous differential equations (in the case of local interactions) [5,6]

$$(U^J(r_e))_{\lambda\lambda'} = 2 \sum_L f_L(l', j'; l'', j''; J) V_L(r_p) \quad (4)$$

where I is the unit matrix, Φ^J is the matrix of radial functions and

$$(I^2)_{\lambda\lambda'} = I'(l' + 1) \delta_{\lambda\lambda'} \quad (5)$$

$$(K^2)_{\lambda\lambda'} = k_j^2 \delta_{\lambda\lambda'} = (2)(E - E_j) \delta_{\lambda\lambda'} \quad (6)$$

$$(U^J(r_e))_{\lambda\lambda'} = 2 \sum_L f_L(l' j'; l'' j''; J) V_L(r_p) \quad (7)$$

where the $f_L(l' j'; l'' j''; J)$ are the well-known, real coefficients of Percival and Seaton [4] and the coupling between the asymptotic (adiabatic) target states is given by the radial matrix elements which we shall discuss in detail in the next Section. Since L is even and $f_L(l' j'; l'' j''; J)$ is real, the $U^J_{\lambda\lambda'}$ is nonzero only if $j' - j''$ is even, i.e. the matrix is block diagonal with two subblocks that contain only even values of $(l' + j')$ or only odd values of $(l' + j')$. Thus, when one starts from $j = 0$ it is only necessary to include those values of the partialwave index l for which $|J - j| \leq l \leq J + j$ and for which $l + J$ is even. When j_{\max} is the maximum value of j included in the expansion (2), then the f_L 's are zero for $L > 2j_{\max}$ when $j' < j_{\max}$ and $j < j_{\max}$.

We have recently developed [7] a suitable numerical algorithm that judiciously performs such controls along the radial evaluation process and modifies the size of the relevant S-matrix. We have called it the Modified Variable Phase Approximation (MVPA) and have employed it in the present case to solve the set of coupled equations (4).

Typically, for numerical convergence we needed to use the full coupling from about 10^{-3} Å (the initial integration point) out to 8.0 Å, then we could gradually reduce the K-matrix size out to 600 Å, for H_2 and out to 2000 Å, for N_2 . This essentially meant that, when we went beyond such size-values for the K-matrix we found that the corresponding cross section values changed by less than 10^{-3} Å², which is taken as our accuracy threshold for the final observables.

The total angular momentum values went up to 5 for H_2 and N_2 , while the target rotational basis was extended up to 16 for H_2 and up to 28 for N_2 . The rotational constant of the former target was taken to be 60.853 cm⁻¹, while it was only 2.01 cm⁻¹ for the latter molecule. The multipolar coefficients of the potential expansion went up to $\lambda_{\max} = 18$ for the hydrogen target and to $\lambda_{\max} = 26$ for the nitrogen target. The corresponding partialwave angular momenta for the scattered electron therefore went up to $l_{\max} = 21$ for the H_2 molecule and up to $l_{\max} = 33$ for the N_2 molecule.

III. THE POSITRON-MOLECULE POTENTIAL

If one starts in the asymptotic region of the interaction, where charge overlap effects have vanished, one can immediately write the dipole leading term of the polarisation part of the full potential V_{pcp} [8]

$$V_{pcp}(r_p) \sim V_{pol}(r_p) = -\frac{1}{2r_p^4} \{ \alpha_0(R) + \alpha_2(R) P_2(\hat{R} \cdot \hat{r}_p) \} \quad (8)$$

where α_0 is the spherical dipole polarisability of the target molecule at its geometry R , α_2 is its non-spherical term and the Legendre polynomial depends on the molecular frame angle $\vartheta = \arccos(\hat{R} \cdot \hat{r}_p)$. We have employed experimental values for such quantities [9]. The present V_{pcp} is based on the correlation energy of a localized e^+ in an e^- gas, and its hybridization with the correct asymptotic form of equation (8). Earlier on [10,11] a similar approach was applied to the problem of a light impurity in an electron gas. In those methods, the electron gas is described by a set of interacting bosons representing the collective excitations in the random-phase-approximation. Further, Boronski and Nieminen [12] described the density-functional theory of the electron-positron system, and presented the results on the positron-electron correlation energy as a function of the density parameter r_s [10-12] for different $n_+(r_s)/n_-(r_s)$ ratios including the case of one positron in a homogeneous electron gas. Here n_+ and n_- denote the densities of positrons and electrons, respectively. It therefore follows that the total V_{pcp} potential for the e^+ -molecule system can now be assembled by writing

$$\begin{aligned}
V_{\text{pcp}}(r_p | R) &= V_{\text{corr}}(r_p | R) \text{ for } r_p < r_c \\
&= V_{\text{pol}}(r_p | R) \text{ for } r_p > r_c \quad (9)
\end{aligned}$$

The connecting parameter r_c is usually around $4.0a_0$ for the present system and varies depending on the chosen multipolar coefficient of the final expansion. The total e^+ -molecule interaction potential can now be obtained in a local form and will also include the exact electrostatic interaction $V_{\text{st}}(r_p)$

$$V_{\text{tot}}(r_p | R) = V_{\text{st}}(r_p | R) + V_{\text{pcp}}(r_p | R) \quad (10)$$

The latter interaction can be further expanded over the usual set of Legendre polynomials

$$V_{\text{tot}}(r_p | R) = \sum_{L=0}^{\infty} V_L(r_p | R) P_L(\hat{r}_p \cdot \hat{R}) \quad (11)$$

the coefficients only take even L values and provide the anisotropic coupling potential terms needed in the scattering eq.s where they are directly included in equation (7).

IV. ROTATIONALLY INELASTIC CROSS SECTIONS

The present results are reported in Figure 1 for both target molecules, with the calculations for the H_2 systems in its ground electronic state shown in the upper panel. The elastic, state-to-state cross sections from the initial level (the $\sigma_{0 \rightarrow 0}$ cross section) is seen to be by far the largest contribution to the process, and to rapidly decrease at low energies from very large values near zero energies. On the other hand, the quadrupole excitation cross section ($j_i = 0 \rightarrow j_f = 2$) is nearly two orders of magnitude smaller and grows to a higher energy plateau from very small threshold values. The same growth is also seen to occur for the ($j_i = 0 \rightarrow j_f = 4$) excitation cross sections, which are however even smaller in size and increase with energy at an even smaller rate. On the whole, we see that the slow positrons appear to be rather inefficient in exciting rotational levels in a molecule like H_2 that presents one of the largest rotational level spacings even at the lower- j states. We therefore expect rather slow cooling rates when H_2 is being used as a buffer gas for a positron beam.

A further indicator of the dominance of the direct quadrupole excitation potential for the present system is shown by the results reported in the upper panel of Figure 2. We show there the computed excitation cross sections from the $j = 0$ initial level up to the $j_f = 8$ final level. Two different collision energies are examined and the computed cross sections are given on a log scale. We clearly see that the excitation efficiency into the higher j_f levels increases with collision energy, as should be expected.

However, we also clearly see that the size of the corresponding cross sections drops dramatically for excitations beyond the direct quadrupolar term, i.e. for $j_f > 2$.

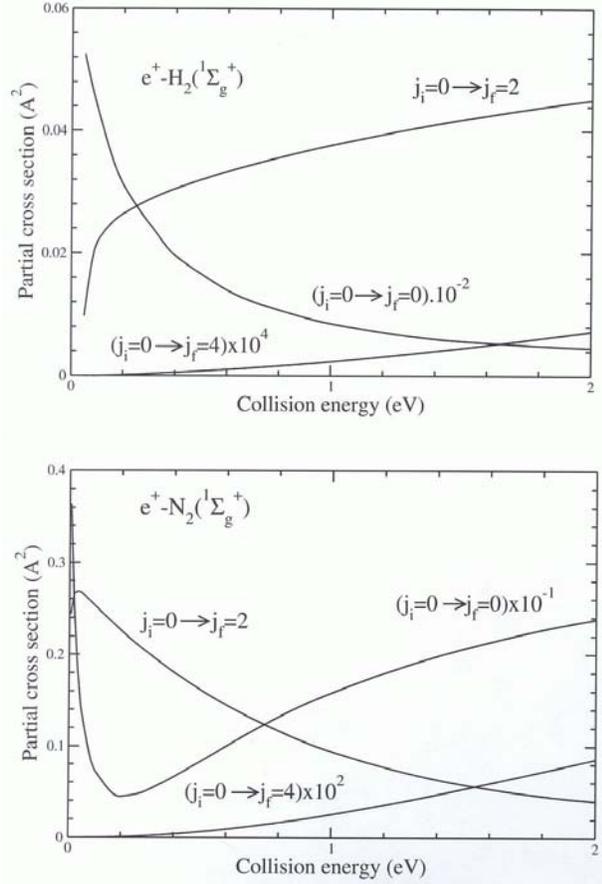


Figure 1. Computed state-to-state, partial integral cross sections for e^+ impact on H_2 (upper panel) and N_2 (lower panel). Some of the cross sections have been scaled to show them all within the same range (units of \AA^2).

Computed state-to-state, partial integral cross sections for e^+ impact on H_2 (upper panel) and N_2 (lower panel). Some of the cross sections have been scaled to show them all within the same range (units of \AA^2). The computed elastic and inelastic, state-to-state partial integral cross sections for positron impact on nitrogen molecules are reported in the lower panel of Figure 1.

One immediately notices that the cross sections are now much larger than in the case of H_2 and exhibit different behaviour as a function of collision energy. The elastic process, ($j_i = 0 \rightarrow j_f = 0$), now presents a marked Ramsauer minimum at low energies and grows to a large plateau of values as the energy increases. The inelastic cross sections, shown in the same panel, have opposite energy dependence and are both much larger than in the case of H_2 : the stronger angular anisotropy of the e^+ interaction with

N_2 compared with H_2 and the markedly smaller rotational constant of the former molecule compared to the latter (about 2 cm^{-1} versus about 60 cm^{-1}) are important factors which favour that direct angular momentum couplings cause larger excitations.

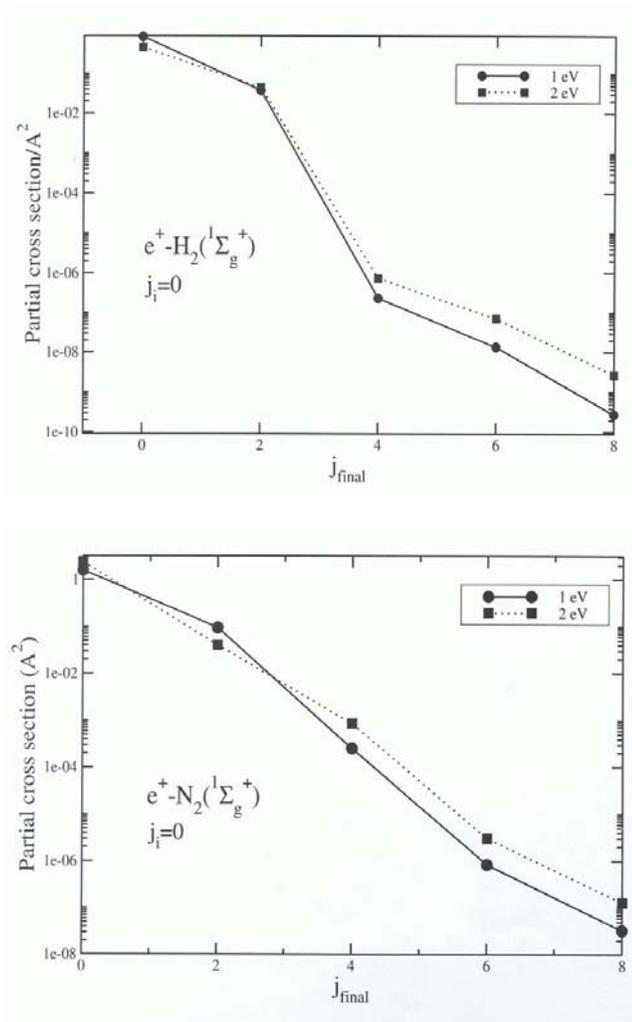


Figure 2. Partial, state-to-state integral cross sections for rotational excitation of H_2 (upper panel) and N_2 (lower panel) by positron impact. The curves in each panel refer to different collision energies. All transitions are from $j_i = 0$ into j_{final} values shown by the horizontal axis.

In one of the earlier papers [13] an approximate estimate of the $(0 \rightarrow 2)$ rotational excitation cross sections suggested a strong peak below 0.05 eV of collision energy. The further calculations in the SF frame of ref. [14] found it around 0.04 eV of collision energy: our present results place the same peak at 0.045 eV . All three results further suggest the size of the peak to be around 0.27 \AA^2 , showing good agreement between three very different estimates.

V. PRESENT CONCLUSIONS

In this work we have analysed in some detail the collisional heating of rotational internal energy in gaseous H_2 and N_2 interacting with a beam of slow positrons, and have limited our calculations to the partial, integral cross sections values. The computational analysis has been carried out within a Space Fixed quantum dynamics that couples the positron motion with the rotating molecular target via a non empirical, anisotropic interaction potential within the close-coupled expansion over rotor states described in Section II. The present results clearly indicate that the heating or cooling efficiency is larger for N_2 in comparison with H_2 , although the larger energy spacings of the latter molecule yield on the whole to larger amounts of energy being transferred between the leptonic projectile and the molecules of the gas. Particular attention has been given to testing numerical convergence by reaching cross section stability around about 0.1% , using the various numerical parameters described in Section IV.

VI. ACKNOWLEDGMENTS

We thank the University of Rome Research Committee for the funding of this research, for supporting the visit of J.S.D. to Rome under an exchange programme with the InSTEC, Havana, Cuba, and for supporting a visit of S.T. to the theory group of the Chemistry Department in the summer-fall of 2002, when this work begun. We are also very grateful to Dr. E. Bodo for several illuminating suggestions and for his help on the use of the MVPA scattering code.

REFERENCES

- [1] ACHE, H.J. (1979): "Positronium and Muonium Chemistry" (Am. Chem. Soc. Press, Washington DC).
- [2] CHARLTON, M. and J.W. HUMBERTSON (2001): "Positron Physics" (Cambridge, University Press, Cambridge UK).
- [3] SURKO, C.M. and F.A. GIANTURCO (Eds) (2001): "New Directions in Antimatter Chemistry and Physics" (Kluwer Academic Publis, Dordrecht, Holland).
- [4] GIANTURCO, F.A. and T. MUKHERJEE (1997): **Phys. Rev.** A55, 1044.
- [5] e.g. see: GIANTURCO, F. A. (1979): "The transfer of molecular energies by collision" (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York).

- [6] EASTES, W. and D. SECREST (1972): **J. Chem. Phys.** 56, 640.
- [7] MARTINAZO, R.; E. BODO, F.A. GIANTURCO (2003): **Comp. Phys. Comm.** 151, 187.
- [8] e.g. see:GIANTURCO, F.A. and A. JAIN (1986): **Phys. Rep.** 143, 347.
- [9] ELZA, B.K.; T.L. GIBSON; M.A. MORRISON and B.C. SAHA (1989): **J. Phys.** B 22, 113.
- [10] O'CONNEL, J.O. and N.F. LANE (1983): **Phys. Rev.** A27, 1893.
- [11] ARPONEN, J.A. and E. PAJANNE (1979): **Ann. Phys.** (N.Y.), 121, 343.
- [12] BORONSKY, E. and R.M. NIEMINEN (1986): **Phys. Rev.** B34, 3820.
- [13] COLEMAN, P.G.; T.C. GRIFFITH and G.R. HEYLAND (1981): **J. Phys.** B 14, 2509.
- [14] MUKHERJEE, T.; A.S. GHOSH and A. JAIN (1991): **Phys. Rev.** {bf A43}, 2538.

LOW-ENERGY ROTATIONAL EXCITATION OF H₂ AND N₂ BY POSITRON IMPACT. II – COMPARISON WITH ELECTRON IMPACT

J. A. Sabin del Valle¹, Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Ciudad de La Habana, Cuba,

S. Telega², Faculty of Applied Physics and Mathematics, Technical University of Gdansk, Poland

F.A. Gianturco^{*3}

^{1,2,3}Department of Chemistry and INFM, University of Rome "La Sapienza", Rome, Italy

ABSTRACT

Low-energy collisional excitation of rotations in H₂ and N₂ by impact with slow positrons in the gas phase is considered by carrying out a Space-Frame (SF) dynamical calculation at energies well below the positronium formation threshold, is compared with similar calculations with electron projectiles.

RESUMEN

Se consideran excitaciones por colisiones de baja energía de rotaciones en H₂ y en N₂ por impacto con positrones lentos en la fase gaseosa llevándose a cabo un cálculo dinámico en el sistema de referencia espacial a energías bien por debajo del umbral de formación del positronium y se compara con cálculos similares con proyectiles electrónicos.

I. INTRODUCTION

The experimental and computational study of low-energy positron scattering from molecular gases, both diatomic species and polyatomic targets, has a relatively long history which is chiefly related to the fundamental interest in the consequences of positron annihilation in gases and in the effects of slowing down positron beams in several media of applied relevance [1-3].

One of the complications created by the use of antiparticles in low-energy processes is the existence of additional channels which are not present in the case of electron beams. Thus, we know of the possibility of forming the positronium (Ps) compound, that adds a distinct 'reactive' channel to the theoretical description of the above processes [1], or that the particle-antiparticle decay channel, whereby the pick off by the positron of a bound electron leads to the emission of 2 or 3 γ photons, can leave molecular cations within the gas and therefore strongly modify the collisional process. In the present study, we therefore compare the behaviour of this leptonic anti-particles with that of its counterpart, the electron particle at the same collision energies and for which none of the above channels exist.

II. THE SPACE-FRAME DYNAMICS

In the present calculations we shall treat the N₂ and H₂ molecular targets as rigid rotors, disregarding from the time being the effects of vibrational excitations during the rotational energy transfer collisions. Furthermore, as reported in the following Section, the interaction with the molecules will be described by a local, energy-independent effective potential between the impinging particle and the rotating target and the electron-molecule interaction will further include a localized form of exchange interactions. The asymptotic target states are given in both cases by simple spherical rotors

$$H_{\text{rot}}(\hat{R}_{\text{eq}})Y_{j\text{m}j}(\hat{R}_{\text{eq}}) = \frac{\hbar^2}{2I}j(j+1)Y_{j\text{m}j}(\hat{R}_{\text{eq}}) \quad (1)$$

with I being the isolated molecule moment of inertia [4] and \hat{R}_{eq} the space orientation of the molecular bond, kept at its equilibrium value. Hence, the total scattering wavefunction is given as

$$\Psi_n(E, r_p, R_{\text{eq}}) = \sum_f u_{i \rightarrow f}(r_p, E) r_p^{-1} Y_f(\hat{R}_{\text{eq}}) \quad (2)$$

where $|f\rangle$ denotes the $|j_f m_f\rangle$ final states of the molecule involved in the expansion and the $u_{i \rightarrow f}(r_p, E)$ are the channel components of the scattering wavefunction, to be determined by solving the usual Schrödinger equation subject to its scattering boundary conditions. All details of the present computations were given in the preceding paper (I) and therefore will not be repeated here.

The numerical convergence tests of the values of the K-matrix were carried out as in the preceding paper (I) and electron-molecule cross section were also considered to be converged within 10^{-3} Å of their values.

III. THE POSITRON-MOLECULE AND ELECTRON-MOLECULE INTERACTIONS

If one starts in the asymptotic region of the interaction, where charge overlap effects have vanished, one can immediately write the dipole leading term of the polarisation part of the full potential V_{pcp} [8]

$$V_{pcp}(r_p) \sim V_{pol}(r_p) = -\frac{1}{2r_p^4} \left\{ \alpha_0(R) + \alpha_2(R) P_2(\hat{R} \cdot \hat{r}_p) \right\} \quad (3)$$

where α_0 is the spherical dipole polarisability of the target molecule at its geometry R , α_2 is its non-spherical term and the Legendre polynomial depends on the molecular frame angle $\vartheta = \arccos(R \cdot r_p)$. We have employed experimental values for such quantities [9]. The present V_{pcp} is based on the correlation energy of a localized e^+ in an e^- gas, and its hybridization with the correct asymptotic form of equation (3). Earlier on [10,11] a similar approach was applied to the problem of a light impurity in an electron gas. In those methods, the electron gas is described by a set of interacting bosons representing the collective excitations in the random-phase-approximation. Further, Boronski and Nieminen [12] described the density-functional theory of the electron-positron system, and presented the results on the positron-electron correlation energy as a function of the density parameter r_s [10-12] for different $n_+(r_s)/n_-(r_s)$ ratios including the case of one positron in a homogeneous electron gas. Here n_+ and n_- denote the densities of positrons and electrons, respectively.

It therefore follows that the total V_{pcp} potential for the e^+ -molecule system can now be assembled by writing

$$\begin{aligned} V_{pcp}(r_p | R) &= V_{corr}(r_p | R) \text{ for } r_p < r_c \\ &= V_{pol}(r_p | R) \text{ for } r_p > r_c \end{aligned} \quad (4)$$

The connecting parameter r_c is usually around 4.0 a_0 for the present system and varies depending on the chosen multipolar coefficient of the final expansion. The total e^+ -molecule interaction potential can now be obtained in a local form and will also include the exact electrostatic interaction $V_{st}(r_p)$

$$V_{tot}(r_p | R) = V_{st}(r_p | R) + V_{pcp}(r_p | R) \quad (5)$$

The corresponding analysis for electrons as projectiles has been already presented elsewhere and will not be discussed here. Suffices it to say that its final form will be similar as that of equation (5) but with the addition of exchange interaction:

$$V_{tot}(r_e | R) = V_{st}(r_e | R) + V_{ex}(r_e | R) + V_{ecp}(r_e | R) \quad (6)$$

The above interactions can be further expanded over the usual set of Legendre polynomials

$$V_{tot}(r_p | R) = \sum_{L=0}^{\infty} V_L(r | R) P_L(\hat{r} \cdot \hat{R}) \quad (7)$$

the coefficients only take even L values and provide the anisotropic coupling potential terms needed in the scattering eq.s where they are directly included in equation (7) of paper (1), both for e^- and e^+ projectiles.

IV. ELECTRON AND POSITRON IMPACT EXCITATION

Due to the dramatic increase in recent years on the breadth and variety of experimental and theoretical data which have been gathered on the low-energy behaviour of leptonic projects, like e^+ and e^- , when undergoing collisions by injection into molecular gases [2,3], it is of some interest to look a bit more in detail at their comparative behaviour when taken to produce rotational heating of the molecules in the ambient gas. An extensive review of such data on diatomic and polyatomic targets has recently provided [14] a great deal of insight on the comparative behaviour of those projectiles.

The $(0 \rightarrow 2)$ excitation cross sections are compared, over the same energy range, in the two panels of Figure 1: the electron scattering calculations are from ref. [13].

In the case of molecular hydrogen (upper panel) we see that the positron results are about two orders of magnitude smaller than in the case of the e^- excitation cross sections. The repulsive static interaction, in the case of the e^+ lepton, keeps the projectile largely away from the inner interaction

regions and therefore causes a reduction of the range of action over which the coupling anisotropy can apply a rotational torque to the target molecule. Such an effect is also present in the case of N_2 where, however, the reduced efficiency of the positron-impact excitation process is particularly evident over the region of the shape resonance. Around 2 eV of collision energy, in fact, the $(0 \rightarrow 2)$ excitation cross sections for electron impact is about 8.0 \AA^2 , to be compared with that from positron scattering of about 0.025 \AA^2 .

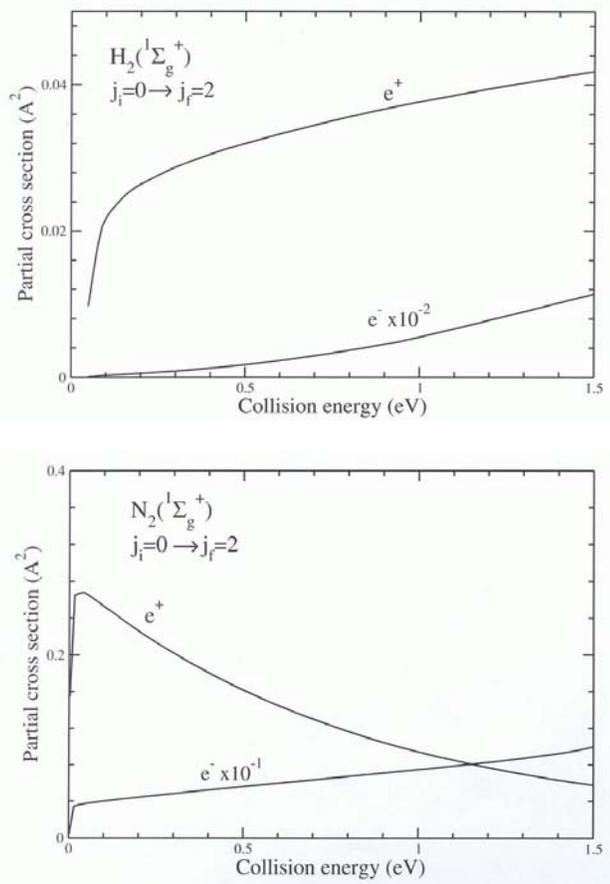


Figure 1. Comparison of computed partial integral cross sections for the $(j_i = 0 \rightarrow j_f = 2)$ process induced by the two leptonic projectiles on H_2 (upper panel) and N_2 (lower panel) molecules. The computed values for e^- are from ref. [13]

The additional calculations of Figure 2 show the same comparison with regard to the $(0 \rightarrow 4)$ excitation cross sections. In the case of the H_2 target the comparison shows similar results to those obtained for the $(0 \rightarrow 2)$ excitations of figure 1: the inelastic efficiency for the e^+ lepton is about 10^{-2} times lower than for electron impact. For the N_2 molecule, on the other hand, the difference is even greater, especially in the resonance region where the electron impact excitation increases by more than one order of magnitude.

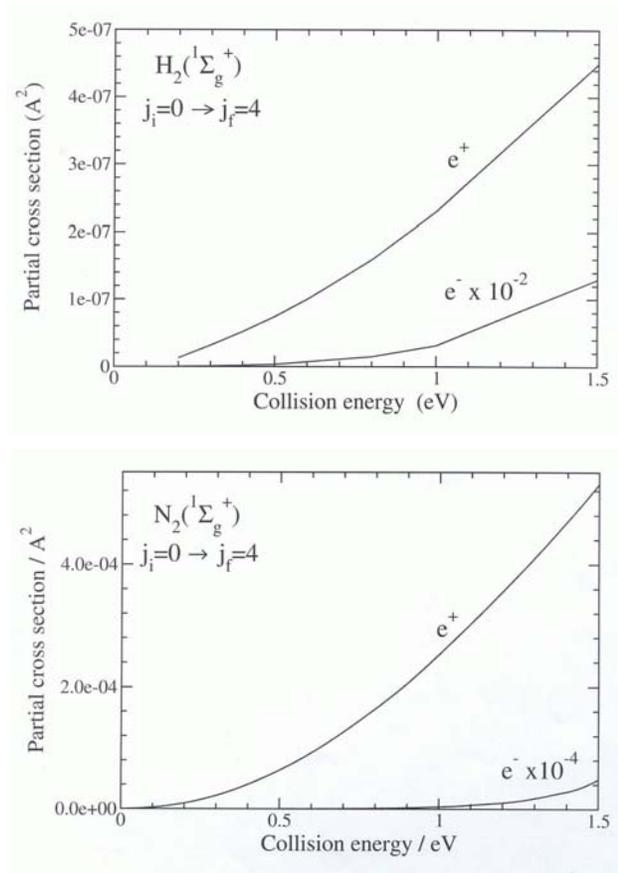


Figure 2. Same as figure 1 but for the state-to-state $(j_i = 0 \rightarrow j_f = 4)$ rotational excitation processes. See caption of Figure 1 for details.

When starting the excitation process from a molecular state higher than $j_i = 0$, the two molecules are shown in Figure 3 to be excited by e^+ and e^- from their $j = 2$ initial level. In both cases we see that the existence of the electron-impact shape resonances (beyond 3 eV for H_2 and around 2 eV for N_2) play a significant role in enhancing rotationally inelastic probabilities, while nothing of the sort exists for the positron excitation processes. Furthermore, we see that both sets of cross sections are markedly larger than the same excitation jumps $(\Delta_j = 2)$ from the $j_i = 0$ levels shows by the Figure 3: the differences between the two leptonic excitation collision cross sections are about one order of magnitude and the cross sections themselves are more than a factor of ten larger than the $(0 \rightarrow 2)$ cross sections of Figure 3. This suggests that initially 'hot' gaseous environments could induce more efficiently the further heating of the molecular gas, thereby more efficiently provide a cooling environment both for e^+ and e^- beams. On the whole, however, these calculations indicate that between the two leptons it is again the electron that turns out to be more efficient in rotationally heating the H_2 and N_2 molecules and that N_2 excitation probabilities are larger than those of H_2 for both types of projectiles.

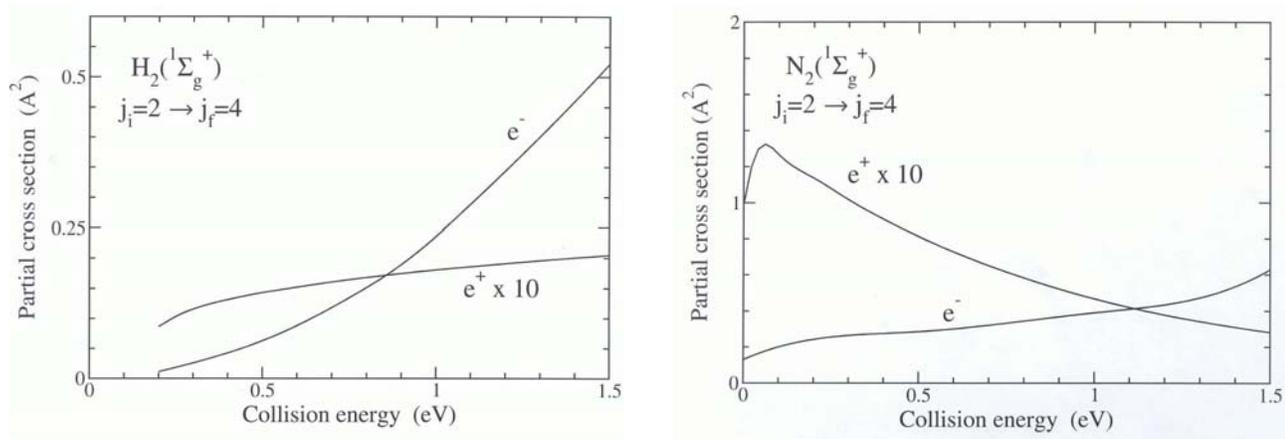


Figure 3. Comparison of impact excitation of H₂ (upper panel) and N₂ (lower panel) molecules from their excited rotational level $j_i = 2$ into $j_f = 4$ level by collisions with the e^+ and e^- . All the results are from present calculations.

VI. ACKNOWLEDGMENTS

We thank the University of Rome Research Committee for the funding of this research, for supporting the visit of J.S.D. to Rome under an exchange programme with the InSTEC, Havana, Cuba, and for supporting a visit of S.T. to the theory

group of the Chemistry Department in the summer-fall of 2002, when this work began. We are also very grateful to Dr. E. Bodo for several illuminating suggestions and for his help on the use of the MVPA scattering code.

REFERENCES

- [1] ACHE, H.J. (1979): "Positronium and Muonium Chemistry" (Am. Chem. Soc. Press, Washington DC).
- [2] CHARLTON, M. and J.W. HUMBERTSON (2001): "Positron Physics" (Cambridge, University Press, Cambridge UK).
- [3] SURKO, C.M. and F.A. GIANTURCO (Eds) (2001): "New Directions in Antimatter Chemistry and Physics" (Kluwer Academic Publis, Dordrecht, Holland).
- [4] GIANTURCO, F.A. and T. MUKHERJEE (1997): **Phys. Rev.** A55, 1044.
- [5] e.g. see: GIANTURCO, F. A. (1979): "The transfer of molecular energies by collision" (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York).
- [6] EASTES, W. and D. SECREST (1972): **J. Chem. Phys.** 56, 640.
- [7] MARTINAZO, R.; E. BODO and F.A. GIANTURCO (2003): **Comp. Phys. Comm.** 151, 187.
- [8] e.g. see: GIANTURCO, F.A. and A. JAIN (1986): **Phys. Rep.** 143, 347.
- [9] ELZA, B.K.; T.L. GIBSON; M.A. MORRISON and B.C. SAHA (1989): **J. Phys.** B 22, 113.
- [10] O'CONNEL, J.O. and N.F. LANE (1983): **Phys. Rev.** A27, 1893.
- [11] ARPONEN, J.A. and E. PAJANNE (1979): **Ann. Phys.** (N.Y.), 121, 343.
- [12] BORONSKY, E. and R.M. NIEMINEN (1986): **Phys. Rev.** B34, 3820.
- [13] TELEGA, S. and F.A. GIANTURCO (2004): **Eur. Phys. J. D.** (in press).
- [14] KIMURA, M.; O. SUEOKA, A. HAMADA and Y. ITIKAZA (2000): **Adv. Chem. Phys.** 111, 537.

SOBRE LAS PROPIEDADES ÓPTICAS DEL VACÍO CUÁNTICO MAGNETIZADO

S. Villalba Chávez y H. Pérez Rojas

Instituto de Cibernética, Matemática y Física, Ciudad de La Habana, Cuba

RESUMEN

A partir de las correcciones radiativas a la ecuación del fotón, se obtiene la dependencia del índice de refracción del vacío cuántico magnetizado con respecto a la intensidad del campo magnético externo. Aquí se discute el llamado segundo modo de propagación del operador de polarización en la aproximación de un lazo. Se analizan los límites de baja frecuencia y la propagación cerca del primer umbral de la resonancia ciclotrónica en el vacío. Los resultados obtenidos pueden ser de interés en un contexto astrofísico.

ABSTRACT

From the radiative corrections to the Maxwell equations, we obtain the behavior of the refraction index of the magnetized quantum vacuum with regard the magnetic field strength. Here we discuss the second mode of propagation of the polarization operator in one loop approximation. The small frequency limit is analyzed and the propagation near of the first pair creation threshold in vacuum. These results might be interesting due to its astrophysical consequences.

I. INTRODUCCIÓN

La concepción del fotón como partícula mediadora de la interacción electromagnética y la incompleta teoría de la radiación clásica fueron los hechos más significativos sobre los cuales Feynman, Schwinger, Dyson y Tomonaga se basaron para desarrollar la electrodinámica cuántica. En dicha teoría, las correcciones radiativas a la ecuación del fotón están expresadas por el operador de polarización $\Pi_{\mu\nu}(k)$, determinando las leyes cuánticas de propagación de las ondas electromagnéticas.

La presencia del operador de polarización en las ecuaciones dinámicas del fotón trae consigo que la propagación de la radiación electromagnética bajo la acción de un campo externo constante (inicialmente estudiado por Bataliny Shabad [2]), no conserve su energía ni su momentum justamente por la posibilidad de intercambiar estas magnitudes con el campo externo mediado por $\Pi_{\mu\nu}(k)$, esto se expresa mediante la ecuación de dispersión de la luz que se modifica a causa de la creación de pares virtuales electrón positrón, lo cual constituye el análogo cuántico de la absorción en los medios materiales. Esta propiedad ha atraído el interés de un número considerable de investigadores debido a que la fenomenología descrita tiene mucho en común con la propagación de la luz en un medio anisótropo. El papel del medio lo desempeña el vacío en el campo externo, mientras que la anisotropía es creada a partir de una elección preferencial en el espacio del vector que caracteriza a dicho campo.

Basado en esta idea, al considerar la propagación de la radiación en el vacío en presencia de un campo magnético externo, Shabad [3,4] mostró la

drástica desviación que sufre la curva representativa de la ecuación de dispersión del fotón respecto a la curva del cono de luz cerca del umbral de creación de pares electrón-positrón. Tres modos de propagación fueron encontrados de acuerdo a cada autovalor del operador de polarización en presencia del campo magnético y unos años más tarde estas propiedades se generalizaron para el caso en el que se incluye la formación de estados ligados por la interacción Coulombiana (positronio).

La manifestación de una ley de dispersión diferente a la del cono de luz sugiere que el índice de refracción del vacío cuántico magnetizado difiera de la unidad. La existencia de tal propiedad pudiera traer consecuencias drásticas en escenarios astrofísicos en el que se presenten campos magnéticos superiores al campo crítico de Schwinger $B_c = m^2/e = 4,4 \cdot 10^{13}$ Gauss, fundamentalmente sobre la desviación de la radiación en la cercanía de objetos magnetizados de alta densidad [1].

El presente trabajo está dirigido a investigar a partir de las ecuaciones de dispersión del fotón en presencia de un campo magnético externo constante, las propiedades ópticas del vacío cuántico magnetizado.

En las secciones II y III resumimos las características fundamentales de las curvas de dispersión del fotón en presencia de un campo magnético intenso constante. Se discuten las expresiones que serán usadas posteriormente en el artículo. En la sección IV se obtienen las dependencias del índice de refracción con el campo en los límites de bajas y altas frecuencias para el fotón en el segundo modo

$a_\mu^{(2)}$ cuando ambas partículas son creadas en el estado básico de Landau $n^2 = n = 0$.

II. MODOS DE PROPAGACIÓN EN UN CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO CONSTANTE

Considerando la calibración de Lorentz $\partial_\mu A^\mu = 0$ las pequeñas amplitudes de las ondas electromagnéticas satisfacen la ecuación lineal

$$\square g_{\mu\nu} A^\nu(x) + \int \Pi_{\mu\nu}(X, X') A^\nu(x') d^4x' = 0 \quad (1)$$

donde x_μ es el cuatrivector de posición y $\mu = 0, 1, 2, 3$.

En la ecuación (1) $\square A_\mu(x)$ corresponde a la parte clásica, mientras que el segundo término es responsable de las correcciones cuánticas, que para pequeñas perturbaciones ondulatorias son descritas por el tensor de polarización $\Pi_{\mu\nu}(x, x')$. Los términos cuyas potencias de $A_\mu(x)$ son mayores que uno no han sido considerados, por lo tanto, la expresión (1) describe la propagación de onda como un proceso lineal, lo cual significa que las perturbaciones ondulatorias no interactúan entre sí.

Supongamos que la intensidad del campo externo es independiente de las coordenadas espacio-temporales, (por lo que el cuatripotencial $A_\mu(x)$ es lineal en las coordenadas), el tensor de polarización como magnitud invariante de calibración debe corresponder a un medio ópticamente homogéneo cuyas propiedades no cambian con el tiempo. Esto se debe a la invarianza trasnacional del tensor de polarización lo que se manifiesta en este de manera que solo es dependiente de la diferencia de las coordenadas $\Pi_{\mu\nu}(x, x') = \Pi_{\mu\nu}(x - x')$.

La solución de la ecuación (1) en la representación de los momentos, puede expresarse como una superposición de los autovectores del operador de polarización siendo

$$4_\mu(k) = \sum_{j=1}^4 \delta(k^2 - \pi^{(j)}) a_\mu^{(j)}(k) \quad (2)$$

donde δ es la función delta de Dirac y k_μ es el cuatrivector momentum. La expresión anterior muestra la existencia de ecuaciones de dispersión las cuales están dadas por

$$k^2 = \pi^{(j)}(k^2, B) \quad (3)$$

en la que $\pi^{(j)}(k^2, B)$ son los diferentes autovalores del operador de polarización.

Como $\Pi_{\mu\nu}$ es una matriz 4×4 , esta deberá tener cuatro autovalores $\pi^{(j)}$ y cuatro autovectores $a_\mu^{(j)}$. Un autovalor y su correspondiente autovector son

conocidos a priori de la condición de transversalidad de $\Pi_{\mu\nu}$, ellos son: $\pi^{(4)}(k) = 0$ y $a_\mu = k_\mu$, lo que implica que esta última forma de propagación sea longitudinal lo cual no es compatible con la condición de Lorentz $k_\mu A_\mu = 0$, de manera que en (2) este modo debe ser omitido.

Debido a que el campo externo es constante y no es afectado por el proceso que ocurre en él, el fotón debe poseer el mismo número de grados de libertad que cuando se propaga en el vacío sin campo externo. Significa que de los tres modos de dispersión restantes dados por (2) sólo dos pueden ser simultáneos y por tanto existan estrictamente dos soluciones de las ecuaciones de dispersión (3), mientras que la tercera es congelada.

En el caso que nos ocupa ($E = 0, B \neq 0$), los autovectores $A_\mu^{(i)}(k)$ pueden ser determinados independientemente de las aproximaciones dinámicas de principios básicos de la invarianza relativista, conjugación de carga, inversión espacio-temporal e invarianza de calibración de la interacción electromagnética, con lo cual siguiendo a Batalin y Shabad [2] tenemos que

$$a_\mu^{(1)}(k) = (F_{\mu\nu}^2 k^\nu) k^2 - k_\mu (k F^2 k), \quad (4)$$

$$a_\mu^{(2)}(k) = F_{\mu\nu}^* k^\nu \quad a_\mu^{(3)}(k) = F_{\mu\nu} k^\nu \quad (5)$$

Haciendo uso de las expresiones $e^{(i)} = \frac{\partial}{\partial x_0} \vec{a}^{(i)}$

$\frac{\partial}{\partial x} a_0^{(i)}$, $h^{(i)} = \nabla \times \vec{a}^{(i)}$, podemos estudiar el comporta-

miento de los campos magnéticos y eléctricos de las ondas descritas por (4,5) con respecto a las componentes del vector de propagación k

$$e^{(1)} = -k_\perp k^2 k_0, \quad h^{(1)} = [k \times k_\parallel] k^2, \quad (6)$$

$$e_\perp^2 = k_\perp k_\parallel^2, \quad e_\parallel^2 = k_\parallel (k_\parallel^2 - k_0^2), \quad h^2 = [k_\perp \times k_\parallel] k_0, \quad (7)$$

$$e^{(3)} = [k_\perp \times k_\parallel] k_0, \quad h_\perp^3 = -k_\perp k_\parallel^2, \quad h_\parallel^3 = -k_\parallel k_\perp^2. \quad (8)$$

donde $k^2 = k_\perp^2 + k_\parallel^2 - k_0^2$ con $k_0 = \omega$ la energía del fotón, mientras que k_\perp y k_\parallel son las componentes perpendicular y paralela del momentum respecto a la dirección del campo magnético externo, respectivamente.

Consideremos las diferentes direcciones de propagación. En este sentido dos casos son esencialmente diferentes: si $k_\perp = 0$, estaremos hablando de propagación longitudinal, de lo contrario existe una transformación de Lorentz a lo largo del campo

magnético externo (constante y homogéneo) la cual no cambia el valor de k_{\perp} anula k_{\parallel} y no introduce un campo eléctrico adicional. Por lo tanto, el caso general de propagación no longitudinal $k_{\perp} \neq 0$, $k_{\parallel} \neq 0$ es reducido a una propagación puramente transversal a la dirección del campo externo ($k_{\parallel} = 0$) en el correspondiente sistema de referencia.

En el caso de propagación perpendicular al campo magnético externo, ($k \perp B$), ($k_{\parallel} = 0$), el segundo y tercer modos son transversalmente polarizados ($e^{(2,3)} \perp k$) en dos planos mutuamente ortogonales ($e^{(2)} \perp e^{(3)}$), mientras que el primer modo es longitudinalmente polarizado ($e^{(1)} \parallel k$) y no tiene campo magnético ($h^{(1)} = 0$), lo cual no corresponde a un fotón físico. Sin embargo si consideramos propagación longitudinal, ($k \parallel B$), ($k_{\perp} = 0$), los modos 1 y 3 son ahora transversos ($e^{(1,3)} \perp B$), siendo los campos eléctricos de estos mutuamente perpendiculares ($e^{(1)} \perp e^{(3)}$). Ahora el primer modo es una onda electromagnética que unida con la correspondiente al tercero, pudieran dar lugar a una onda transversa circularmente polarizada debido a la propiedad de degeneración $\pi^{(1)}(\omega^2 - k_{\parallel}^2, 0) = \pi^{(3)}(\omega^2 - k_{\parallel}^2, 0)$. Lo escrito anteriormente es una medida de la simetría cilíndrica que presenta el problema de la propagación de la radiación a lo largo del campo magnético externo. Bajo tales circunstancias el segundo modo deja de ser físico, pues presenta una polarización longitudinal ($e^{(2)} \parallel k$) y su campo magnético desaparece ($h^{(2)} = 0$).

En este trabajo consideramos solamente la región de transparencia (no consideramos la absorción del fotón para crear pares observables de e^{\pm}), por lo que estaremos refiriéndonos a los dominios cinemáticos en los que los autovalores del operador de polarización son reales.

La creación de pares en umbrales superiores es inestable debido a que los estados de electrones y positrones en niveles de Landau excitados decaen rápidamente al estado básico por mediación de emisión fotónica. Es por eso que en lo que sigue estaremos haciendo referencia al primer umbral de creación de pares en el vacío. Se trabajará fundamentalmente con el segundo modo de propagación dado a que en condiciones reales la producción y propagación de fotones γ en el tercer modo tienden a decaer al segundo modo por mediación del proceso de división fotónica $\gamma \rightarrow \gamma\gamma$ [7, 8].

III. CREACIÓN DE PARES EN EL VACÍO

La solución general de (3) tiene la estructura

$$\omega^2 = k_{\parallel}^2 + f_i(k_{\perp}^2, B) \quad (9)$$

dictada por la covarianza relativista de los autovalores $\pi^{(i)}(k)$, nótese que, a diferencia del caso en ausencia de campo, en la ley de dispersión del fotón aparece un término dependiente de la intensidad de campo magnético externo ($f_i(k_{\perp}^2, B)$) el cual podemos identificar como el cuadrado de la energía de interacción del cuanto de radiación con el campo, mediado por los pares virtuales electrón positrón. Conforme a [12,13] el fotón presenta un momento magnético dirigido en la dirección de B cuyo valor modular está dado por $\mu_{\gamma} = |(k/k_{\perp})(\partial\omega/\partial B)|$. Para fotones con energía cercana al umbral de creación de pares, los autovalores de los modos de propagación pueden ser escritos aproximadamente como [10].

$$\pi_{n,n'}^{(i)} \approx -2\pi\phi_{n,n'}^{(i)} / |\Lambda| \quad (10)$$

$$\text{con } |\Lambda| = (k_{\perp}'^2 - k_{\perp}''^2) (k_{\perp}'^2 - \omega^2 + k_{\perp}''^2)^{1/2}$$

$$y \quad k_{\perp}'^2 = m_0^2 [(1 + 2nB/B_c)^{1/2} + (1 + 2n'B/B_c)^{1/2}]^2,$$

$$k_{\perp}''^2 = m_0^2 [(1 + 2nB/B_c)^{1/2} - (1 + 2n'B/B_c)^{1/2}]^2$$

donde $k_{\perp}'^2$ es el cuadrado de la energía de umbral de creación de pares e^{\pm} , estando el electrón y el positrón en los niveles de Landau n y n' , mientras que $k_{\perp}''^2$ es el cuadrado de la energía de excitación entre los niveles de Landau antes mencionados.

En la vecindad del primer umbral de la primera creación de pares $n = n' = 0$ y considerando $k_{\perp} \neq 0$ y $k_{\parallel} \neq 0$ de acuerdo a lo antes expuesto, las ondas son descritas por el segundo y el tercer modo, pero solamente el segundo modo presenta una singularidad cerca del umbral $k_{\perp}'^2 = 4m_0^2$, y en ese caso ϕ_{00}^2 tiene la estructura

$$\phi_{00}^2 = -\frac{2\alpha B m_0^4}{\pi B_c} \exp\left(-\frac{k_{\perp}^2 B_c}{2m_0^2 B}\right) \quad (11)$$

con $\alpha \sim 1/137$ la constante de estructura fina, en este caso $k_{\perp}''^2 = 0$.

La aproximación de los modos (10) ajusta la ecuación de dispersión (3) a una ecuación cúbica en la variable $z_1 = \omega^2 - k_{\parallel}^2$ que puede ser resuelta aplicando la formulación de Cardano. Nos referimos en lo que sigue a (9) como la solución real de esta ecuación.

Definamos la función $\Lambda^* = (k_{\perp}^{n2} - k_{\perp}'^2)(k_{\perp}^2 - k_{\perp}'^2)$ para dar la solución (9) en términos de esta, siendo

$$f_i^{(1)} = \frac{1}{3} \left[2k_{\perp}^2 + k_{\perp}'^2 + \frac{\Lambda^*}{(k_{\perp}^{n2} - k_{\perp}'^2)G^{1/3}} + \frac{G^{1/3}}{k_{\perp}^{n2} - k_{\perp}'^2} \right] \quad (12)$$

donde

$$G = 6\pi\sqrt{3}D - \Lambda^* + 54\pi^2\phi_{n,n'}^2(k_{\perp}^{n2} - k_{\perp}'^2)^2$$

con

$$D = \sqrt{-(k_{\perp}'^2 - k_{\perp}^{n2})^2 \Lambda^* \phi_{n,n'}^2 \left[1 - \frac{27\pi^2\phi_{n,n'}^2 \zeta(k_{\perp}^{n2} - k_{\perp}'^2)^2}{\Lambda^*} \right]}$$

La solución anterior es válida para aquellos valores de k_{\perp}^2 tales que excedan la raíz k_{\perp}^{*2} de la ecuación $D = 0$, la cual podemos escribir como

$$k_{\perp}^{*2} \cong k_{\perp}'^2 - 3 \left(\frac{\pi^2 \phi_{n,n'}^2 (k_{\perp}'^2)}{k_{\perp}^{n2} - k_{\perp}'^2} \right)^{1/3}$$

Además de (12), existen dos soluciones complejas y están localizadas en la segunda región del plano complejo de la variable z_1 . En $k_{\perp}^2 > k_{\perp}^{*2}$ estas dos soluciones complejas están dadas por

$$f_i^{(2)} = \frac{1}{6} \left[2(2k_{\perp}^2 + k_{\perp}'^2) - \frac{(1+i\sqrt{3})\Lambda^*}{(k_{\perp}^{n2} - k_{\perp}'^2)G^{1/3}} - \frac{(1-i\sqrt{3})G^{1/3}}{k_{\perp}^{n2} - k_{\perp}'^2} \right]$$

y

$$f_i^{(3)} = \frac{1}{6} \left[2(2k_{\perp}^2 + k_{\perp}'^2) - \frac{(1-i\sqrt{3})\Lambda^*}{(k_{\perp}^{n2} - k_{\perp}'^2)G^{1/3}} - \frac{(1+i\sqrt{3})G^{1/3}}{k_{\perp}^{n2} - k_{\perp}'^2} \right]$$

Tomando como variables $z_1 = \omega^2 - k_{\parallel}^2$ y k_{\perp}^2 las curvas de dispersión (primeramente obtenidas por Shabad [4, 6]) para el segundo modo cerca de la primera forma resonante ($n = n' = 0$) tiene el comportamiento mostrado en la Figura 1.

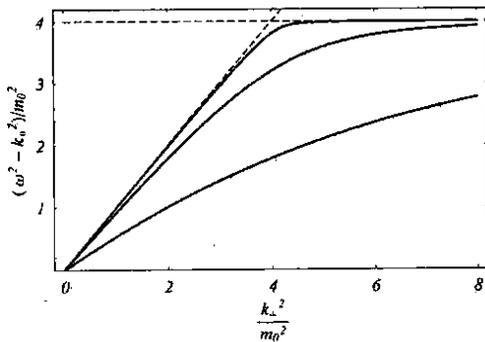


Figura 1. Curvas de dispersión del fotón en el segundo modo de propagación en la primera forma resonante $k_{\perp}^2 = 4m_0^2$ con $n = n' = 0$. El valor del campo magnético externo, correspondiente a cada curva, es (de arriba abajo) $B = 10B_c$, $B = 100 B_c$, $B = 1000 B_c$.

IV. VELOCIDAD DE GRUPO TRANSVERSA

La velocidad del grupo para cada modo está dada por

$$\mathbf{V} = \nabla_{\mathbf{k}} \omega$$

En particular los módulos de las componentes de la velocidad de grupo pueden escribirse como

$$v_{\perp} = \frac{\partial \omega}{\partial k_{\perp}} = \frac{k_{\perp}}{\omega} \frac{df_i(k_{\perp}^2)}{dk_{\perp}^2}, \quad v_{\parallel} = \frac{\partial \omega}{\partial k_{\parallel}} = \frac{k_{\parallel}}{\omega} \quad (13)$$

Nótese que la velocidad de grupo no coincide, (siempre que $k_{\perp} \neq 0$), con la velocidad de fase. De la expresión (13) se llega a que la dirección en que se propaga la energía forma un ángulo θ el cual satisface la relación

$$\tan \theta = \frac{v_{\perp}}{v_{\parallel}} = \frac{k_{\perp}}{k_{\parallel}} \frac{df_i(k_{\perp}^2)}{dk_{\perp}^2} = \frac{df_i(k_{\perp}^2)}{dk_{\perp}^2} \tan \vartheta$$

donde ϑ es el ángulo entre el momentum del fotón y el campo magnético externo, $\tan \vartheta = k_{\perp}/k_{\parallel}$.

Consideremos inicialmente el límite $\omega^2 - k_{\parallel}^2 \ll 4m_0^2$, en este caso la ley de dispersión tiene la siguiente forma [11]

$$\omega^2 - k_{\parallel}^2 \cong k_{\perp}^2 \left(1 + \frac{\alpha}{3\pi} \frac{B}{B_c} \right)^{-1} \quad (14)$$

En este caso la velocidad de grupo transversa y paralela al campo pueden ser escrita como

$$v_{\parallel} = \frac{k_{\parallel}}{\omega}, \quad v_{\perp} = \frac{k_{\perp}}{\omega} \left[1 + \frac{\alpha}{3\pi} \frac{B}{B_c} \right]^{-1} \quad (15)$$

luego el cuadrado del módulo de la velocidad de grupo es

$$v^2 = \frac{1}{1 + \frac{\alpha}{3\pi} \frac{B}{B_c}} + \frac{\frac{\alpha}{3\pi} \frac{B}{B_c} \cos^2 \vartheta}{1 + \frac{\alpha}{3\pi} \frac{B}{B_c} \cos^2 \vartheta} \quad (16)$$

Tomando la derivada implícita respecto a k_{\perp} en (3) y haciendo uso de (10), cerca del primer umbral la velocidad de grupo está dada por

$$v_{\perp} = \frac{2k_{\perp}(\omega^2 - 4m_0^2)J}{\omega(\pi\phi_{00}^{(2)} - 2m_0(4m_0^2 - \omega^2)^{3/2})} \quad (17)$$

$$\text{siendo } J = \left(\pi \frac{\partial \phi_{00}^{(2)}}{\partial k_{\perp}^2} + m_0(4m_0^2 - \omega^2)^{1/2} \right).$$

La dependencia de la velocidad de grupo perpendicular respecto al cuadrado del momentum perpendicular y la intensidad del campo magnético externo son mostrados en las Figuras 2 y 3 respectivamente.

V. PROPIEDADES DEL ÍNDICE DE REFRACCIÓN

El índice de refracción del i -ésimo modo está dado por

$$n_i = \frac{|k|}{\omega} = \left[1 + \frac{k_{\perp}^2 - f_i(k_{\perp}^2, B)}{\omega^2(k^2, B)} \right]^{-1/2}. \quad (18)$$

Este último se puede expresar en función del momento magnético anómalo del fotón [12,13] $n_i = [1 + \mu_{\gamma}^{(i)} \cdot Bg(\omega)]^{1/2}$ donde $g(\omega)$ es una función dependiente de la energía.

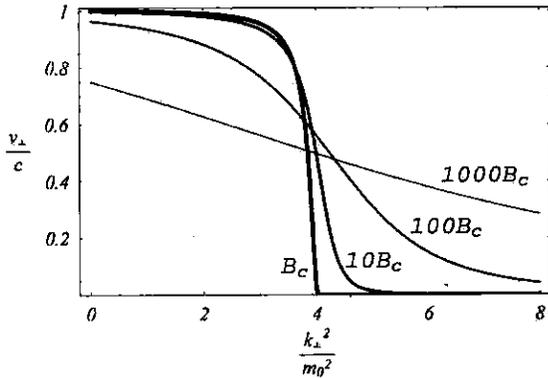


Figura 2. Gráfica de la velocidad de grupo perpendicular al campo magnético externo como función del cuadrado del momentum transversal. Aquí $k_{\parallel} = 0$.

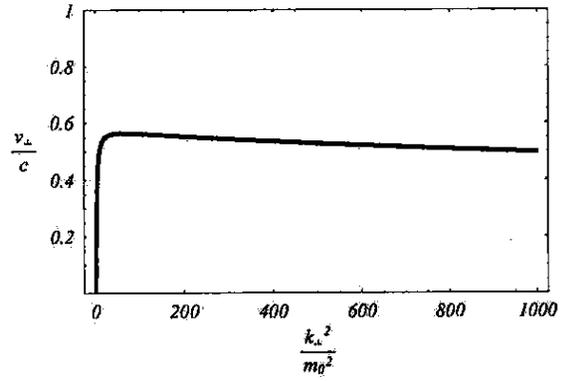


Figura 3. Comportamiento de la velocidad de grupo transversal respecto a la intensidad del campo magnético externo cuando $k_{\perp}^2 = 4m_0^2$ y la onda se propaga en el segundo modo. Aquí $k_{\parallel} = 0$.

De la invarianza de calibración de los autovalores del operador de polarización se tiene que el índice de refracción $n_i = 1$ cuando la propagación es puramente paralela ($k_{\perp} = 0$), debido a que $f_i(0, B) = 0$. Por lo que una onda electromagnética propagándose estrictamente en la dirección del campo magnético externo constante no presenta un término de interacción con el campo y cumple con la ley del cono de luz.

El índice de refracción (18) en este modo bajo la aproximación $\omega^2 - k_{\parallel}^2 \ll 4m_0^2$ se expresa mediante

$$n = \left(\frac{1 + \frac{\alpha B}{3\pi B_c}}{1 + \frac{\alpha B}{3\pi B_c} \cos^2 \vartheta} \right)^{1/2} \quad (19)$$

el cual es dependiente de la dirección del momentum del fotón y es máximo cuando la propagación es puramente transversal ($k_{\parallel} = 0$, $\vartheta = \pi/2$). En este último caso, para campos magnéticos del orden del campo crítico de Schwinger, la relación entre el índice de refracción y el momento magnético de la radiación [12, 13] está dada por:

$$n_{\perp}^2 = (1 + 2\mu_{\gamma}^{(2)} B/k_{\perp})^{1/2} \quad (20)$$

siendo $\mu_{\gamma}^{(2)} = \frac{2\mu'}{3m_0} k_{\perp}$ y μ' el momento magnético anómalo del electrón.

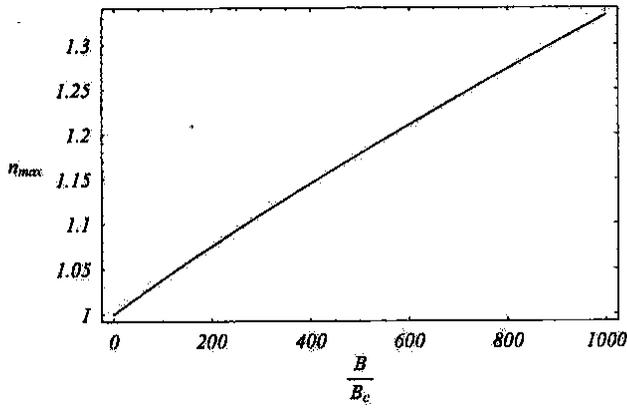


Figura 4. Dependencia del índice de refracción máximo del vacío cuántico magnetizado con respecto al campo magnético externo en la aproximación de bajas frecuencias $\omega^2 - k_{||}^2 \ll 4m_0^2$. Aquí $k_{||} = 0$.

Nótese que para valores del campo $B \sim 10^{16}$ G los valores obtenidos indican que el vacío cuántico magnetizado se comporta como un medio cuyo índice de refracción coincide con los de los líquidos y cristales a presión atmosférica y en ausencia de campo externo.

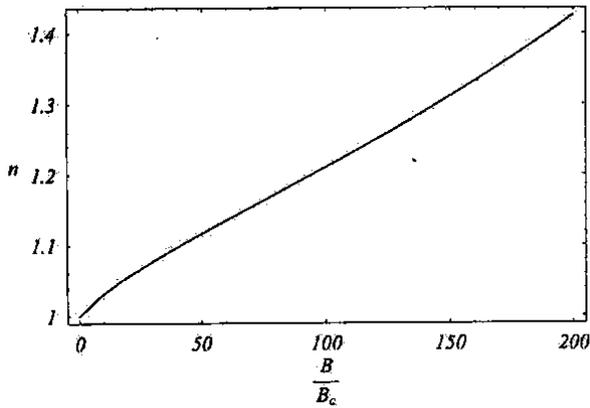


Figura 5. Comportamiento del índice de refracción máximo del vacío cuántico magnetizado con respecto a $|B|$ cerca del primer umbral de creación de pares $k_{\perp}^2 = 4m_0^2$ para ondas propagándose en el segundo modo. Aquí $k_{\perp}^2 = k_{\perp}^2$ y $k_{||} = 0$.

Para fotones muy energéticos con energías cercana al primer umbral el índice de refracción presenta el comportamiento mostrado en la Figura 5 siendo $k_{||} = 0$.

Nótese que para este caso los valores típicos del índice de refracción de líquidos y cristales a presión atmosférica son obtenidos para campos magnéticos $B \sim 10^{15}$. Esto es consecuencia de la interacción de

los pares virtuales e^{\pm} con el campo magnético externo, lo cual se señala un aumento del coeficiente de absorción $\Gamma = 2^{-1/2}([k_{||}^2 - m_0^2 \text{Re } f_{2,3}]^2 + [m_0^2 \text{Im } f_{2,3}]^2 - k_{||}^2 - m_0^2 \text{Re } f_{2,3})^{1/2}$ con $|B|$.

En este último caso hemos graficado en un intervalo más pequeño debido a que la validez de la aproximación de la ecuación cúbica está dada para campos menores que $B^* \sim 3B_c/2\alpha \cong 10^{16}$ Gauss cuando $k_{\perp}^2 = k_{\perp}^2$.

A diferencia del segundo modo de propagación, el autovalor correspondiente al tercer modo no presenta singularidad en el primer umbral [11] y la ecuación de dispersión está dada por

$$\omega^2 = k_{||}^2 + k_{\perp}^2 \left(1 - \frac{\alpha}{3\pi Z}\right) \quad (21)$$

siendo $Z = 1 - \frac{\alpha}{3\pi} \left(\ln \frac{B}{B_c} - C - 1,21\right)$, con C la constante de Euler. Para campos que no son exponencialmente grandes, ($B \sim B_c$), el índice de refracción puede escribirse como

$$n = 1 + \frac{\alpha}{6\pi} \sin^2 \vartheta = 1 + \frac{\mu_{\gamma}^{(3)}}{4\pi\mu' |k|} m_0 \sin \vartheta \quad (22)$$

siendo $\mu_{\gamma}^{(3)} = \frac{2\mu'}{3m_0} k_{\perp}$.

VI. CONCLUSIONES

Finalmente concluimos que el vacío cuántico magnetizado se comporta de manera análoga a un medio anisótropo en el que la dispersión de la luz ocurre por mediación de la interacción del momento magnético del fotón con el campo magnético externo. El índice de refracción coincide con la unidad para ondas electromagnéticas propagándose longitudinalmente al campo a causa de la invarianza de calibración de la teoría. El comportamiento del índice de refracción para valores de campos magnéticos extremadamente intensos $|B| \sim 10^{16}$ G, toma valores típicos de líquidos y gases a presión atmosférica cuando la energía de la radiación es pequeña comparada con la correspondiente al primer umbral. Esta característica se mantiene cuando la energía del fotón está próxima a la creación de pares para campos del orden de $\sim 10^{15}$ Gauss debido al aumento de fenómenos de absorción.

REFERENCIAS

- [1] DENISOV, V.I.; I.P. DENISOVA and S.I. SVERTILOV (2001): Doklady Akademii Nauk 380, 325.
- [2] BATALIN, I.A. and A.E. SHABAD (1971): **JETP** 33, 483.
- [3] SHABAD, A.E. (1972): **Lettera Nuovo Cimento** 2,457.
- [4] _____ (1975): **Ann. Phys.** 90, 166.
- [5] PÉREZ ROJAS, H. and A.E. SHABAD (1979): **Ann. Phys.** 121, 432.
- [6] SHABAD, A.E. (1983): **Astrophys. space Sci.** 102, 327.
- [7] ADLER, S.L. (1996): **Phys. Rev. Lett.** 77, 1695.
- [8] USOV, V.V. (2002): **ApJ L** 87, 572.
- [9] PÉREZ ROJAS, H. and E. RODRÍGUEZ QUERTS (2003): **Proceeding of the International Workshop on Strong Magnetic Field and Neutron Stars**. Instituto de Cibernética Matemática y Física (ICIMAF), 189.
- [10] PÉREZ ROJAS, H. and A.E. SHABAD (1982): **Ann. Phys.** 138, 1.
- [11] SHABAD, A.E. (2003): **Proceeding of the International Workshop on Strong Magnetic Field and Neutron Stars**. Instituto de Cibernética Matemática y Física (ICIMAF, Havana) edited jointly by CBPF, Rio de Janeiro, ICIMAF, UFRGS, Porto Alegre, Brazil, 201.
- [12] VILLALBA CHÁVEZ, S.; H. PÉREZ ROJAS and A.E. SHABAD: "On the Photon Anomalous Magnetic Moment" (en vías de publicación).
- [13] _____: "Anomalous Magnetic Moment of the Photon in a Constant Magnetic Field", (en vías de publicación).

EL CAOS CLÁSICO EN LOS COMPLEJOS MOLECULARES $\text{GrBr}_2(\text{X})$ ($\text{Gr} = \text{He, Ne, Ar}$)

Maykel Leonardo González Martínez* y Jesús Rubayo Soneira**

Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Ciudad de La Habana, Cuba

RESUMEN

Se estudia la estructura del espacio de fases de un modelo hamiltoniano genérico, que describe la dinámica vibracional de los complejos moleculares $\text{GrBr}_2(\text{X})$ ($\text{Gr} = \text{He, Ne, Ar}$), mediante la construcción de las superficies de sección de Poincaré y su interpretación utilizando resultados de la Teoría de Perturbaciones Canónicas. Los resultados permiten afirmar que los sistemas estudiados son cuasi-integrables, y que los coeficientes de colocación contienen, al menos, información cualitativamente importante sobre el grado de perturbación de tales hamiltonianos. Se encuentra que dicho grado de perturbación depende significativamente del isómero considerado (lineal o T), así como del gas inerte involucrado. Se comenta además, brevemente, un rasgo no deseado en la superficie de energía potencial reportada en [27] para la molécula HeBr_2 , que no ha sido abordado hasta el momento en la literatura científica.

ABSTRACT

The phase space structure of a generic Hamiltonian model describing the vibrational dynamics of the molecular complexes $\text{GrBr}_2(\text{X})$ ($\text{Gr} = \text{He, Ne, Ar}$) is studied, by constructing the Poincaré surfaces of section and considering results of the Canonical Perturbation Theory. According to our results, we can assure that all the systems studied here exhibit near-integrable behavior, and that the collocation coefficients contain qualitatively important information about the Hamiltonian perturbation strength. The cited perturbation strength, is found to be strongly dependent on the considered isomer (linear or T) so as the rare gas involved. Finally, an undesired feature of the potential energy surface reported in [27] for the HeBr_2 molecule is also briefly commented.

I. INTRODUCCIÓN

Cuando en 1976, Levy y sus colaboradores [1] obtuvieron el espectro de fluorescencia de la molécula de HeI_2 mediante su excitación con láser, lograron tal impacto en la comunidad científica que muchos de sus colegas entonces y durante las casi tres décadas subsiguientes, se orientaron en lo que ha devenido una nueva línea de investigación en el campo de la química-física: el estudio de los complejos gas inerte-dihalógeno.

Desde esa fecha, los numerosos trabajos dedicados al tema han destacado a estos compuestos como representantes de una muy amplia variedad de comportamientos dinámicos, motivo por el que se han consolidado como un problema modelo de enorme importancia en la comprensión de las interacciones intermoleculares en sistemas de van der Waals [2], así como para la investigación del acoplamiento vibracional y electrónico. Entre las líneas que han sido abordadas en los mencionados estudios se encuentran, el análisis de los mecanismos de transferencia de energía [3] - [5], de la fotodisociación [6] y de la predisiociación vibracional [7] - [9], destacándose el último como principal proceso en que estos sistemas intervienen.

No obstante, se le ha prestado una menor atención al análisis de la inestabilidad dinámica en estos compuestos, tema sobre el que existen comparativamente pocos estudios en la literatura (i.e. [10] - [13]) y que, sin embargo, tiene la función de complementar el análisis de la dinámica de los mismos y es de gran importancia al considerar la relajación vibracional intramolecular en pequeñas moléculas [14] - [16].

Hasta hace muy poco, para el estudio de la dinámica de estas moléculas, lo común [17, 18] era usar potenciales calculados como una suma de las interacciones por diátomos, considerándolos por separado. Sin embargo, estudios teóricos más detallados [19], han mostrado que este modelo no es consistente con las observaciones experimentales. En particular, datos espectroscópicos recientes [20, 21], y cálculos semiempíricos [22, 23] y *ab initio* de alto nivel [24]-[28], muestran que la topología de la superficie de energía potencial (SEP) en el nivel electrónico básico (X) de algunos de estos complejos moleculares, es de dos mínimos, uno en configuración lineal (linear shaped) y el otro en configuración T (T-shaped), lo cual es irreproducible mediante el cálculo del potencial como una suma por pares, que para este estado predice solo estructuras del último tipo.

E-mail: *mleo@fctn.isctn.edu.cu

**jrs@fctn.isctn.edu.cu

El análisis y explicación de esta nueva topología están considerados dentro de los retos actuales de la teoría general de las interacciones intermoleculares.

El objetivo de este trabajo es realizar un estudio, desde el punto de vista clásico, de la estructura del espacio de fases en cierta clase de sistemas moleculares reales, los GrBr_2 ($\text{Gr} = \text{He}, \text{Ne}, \text{Ar}$), utilizando esta nueva topología de las SEP para el estado básico que enriquece considerablemente la dinámica de los mismos. Para lograrlo se hace uso de algunos de los resultados generales de la Teoría de las Perturbaciones Canónicas (TPC). Pueden considerarse como objetivos complementarios el análisis y breve comentario de un rasgo de los potenciales reportados en [27], que no ha sido abordado hasta ahora en la literatura especializada.

Este trabajo está organizado de la siguiente manera: en el apartado II.A se introduce el sistema de ecuaciones de Hamilton analizado, justificando razonablemente las aproximaciones empleadas. La subsección II.B está referida a algunas de las características y herramientas usadas para el estudio del caos en sistemas hamiltonianos, incluyendo una breve introducción a la TPC. En la subsección II.C se comentan los detalles numéricos del trabajo y otras cuestiones específicas. Los resultados obtenidos son reportados y discutidos en la Sección III. En la Sección IV se hacen las conclusiones y, por último, el Anexo A está destinado a la descripción del método de interpolación conocido como de colocación.

II. METODOLOGÍA

A. Los complejos moleculares $\text{Gr-Br}_2(\mathbf{X})$

Para describir los complejos triatómicos fueron usadas las coordenadas de Jacobi (r, R, θ), siendo R la distancia intermolecular del átomo Gr desde el centro de masas del Br_2 , r la longitud de enlace del Br_2 , y θ el ángulo entre los vectores R y r . Debido a la debilidad del enlace de vdW , las frecuencias asociadas al movimiento del enlace Br-Br y el resto de las vibraciones moleculares difieren aproximadamente en dos órdenes de magnitud, por lo que r fue congelada con el valor de la distancia de equilibrio $r_e = 2.281$. Adicionalmente, se tomó nulo el momentum angular total $J = 0$. De esta forma, el hamiltoniano clásico correspondiente a este modelo de dos grados de libertad de los complejos, es:

$$\hat{\phi}_{\text{Gr}} = \frac{p_R^2}{2\mu_{\text{Gr,Br}_2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu_{\text{Gr,Br}_2} R^2} + \frac{1}{\mu_{\text{Br}_2} r_e^2} \right) p_\theta^2 + V_G(r_e, R, \cos \theta) \quad (1)$$

donde $\mu_{\text{Gr,Br}_2}^{-1} = m_{\text{Gr}}^{-1} + (2m_{\text{Br}})^{-1}$ y $\mu_{\text{Br}_2}^{-1} = m_{\text{Br}}^{-1} + m_{\text{Br}}^{-1}$ son las masas reducidas mientras que p_R y p_θ son los momenta conjugados a las coordenadas R y θ respectivamente.

Para reproducir las SEP, los potenciales de interacción fueron tomados de [27]. Se usaron expresiones analíticas del tipo combinado Morse-vdW:

$$V_{\text{Gr}}(R, \theta_i) = \alpha_0^i \left\{ \left(\exp[-\alpha_1^i(R - \alpha_2^i)] - 1 \right)^2 - 1 \right\} - \frac{\alpha_3^i}{R^6} - \frac{\alpha_4^i}{R^8} \Bigg|_{\text{Gr}} \quad (2)$$

donde los α_j^i son coeficientes reportados para cada $\theta_i = 0, 30, 60, 90^\circ$ a partir de los ajustes. Para representar los potenciales bidimensionales de la interacción Gr-Br_2 , se realizó una expansión en polinomios de Legendre:

$$V_{\text{Gr}}(r_e, R, \cos \theta) = \sum_{\lambda} V_{\lambda, \text{Gr}}(R) P_{\lambda}(\cos \theta) \quad (3)$$

siendo obtenidos los coeficientes $V_{\lambda}(R)$ mediante el método de colocación, y $\lambda = 0, 2, 4, 6$ debido a la simetría de los complejos respecto a $\theta = 90^\circ$.

B. Herramientas empleadas para el análisis de la estructura del espacio de fases

Para visualizar y analizar los espacios de fases de alta dimensionalidad como los que tratamos aquí, se emplea usualmente una técnica matemática ideada por H. Poincaré que reduce el problema a uno con menos dimensiones y consiste básicamente en analizar las intersecciones de las órbitas generadas por el hamiltoniano del sistema con una superficie Σ seleccionada adecuadamente, tomando fijo un sentido del movimiento. La aplicación resultante $\phi: \Sigma \rightarrow \Sigma$ (mapa de Poincaré) conserva muchas de las propiedades de la estructura del espacio de fases que la originó por lo que brinda información valiosa sobre la misma [29]-[31].

Del análisis e interpretación de dichos mapas, para el caso de hamiltonianos cuasi-integrables, se encarga la Teoría de las Perturbaciones Canónicas; la cual tiene como base teórica a un extenso grupo de teoremas y métodos entre los que resaltan el Teorema KAM [32] y el Teorema de Poincaré-Birkhoff [33]. Su principio general, para el estudio del movimiento generado por un hamiltoniano ε , consiste en la descomposición de este en un hamiltoniano integrable conocido 0 y una suma de términos que pueden ser considerados pequeñas perturbaciones al mismo, es decir:

$$\hat{\phi}^\varepsilon = \hat{\phi}^0 + \varepsilon \hat{\phi}^1 + \varepsilon^2 \hat{\phi}^2 + \dots \quad (4)$$

donde ε es el llamado *parámetro de la perturbación*.

En los mapas de Poincaré correspondientes a este tipo de sistemas siempre coexisten trayectorias regulares y zonas de movimiento estocástico. Además, es muy frecuente observar un grupo de estructuras denominadas *islas*, las cuales contornean las resonancias del mismo y surgen debido a la distorsión sufrida por las curvas invariantes en el entorno de estas.

Estas resonancias (y también las mencionadas islas), se dividen en primarias, secundarias, etc.; lo que en principio está determinado por el término en el desarrollo (4) del cual constituyan trayectorias periódicas cerradas, de manera que, por ejemplo, las resonancias secundarias acoplan el movimiento alrededor de las islas primarias y así sucesivamente. La mencionada interacción entre dichas estructuras juega un rol crucial en la aparición del movimiento estocástico. La explicación de estas estructuras y otros muchos logros de la *TPC* son excelentemente expuestos en [29].

Por último, debemos señalar que la *TPC* no tiene un rango de aplicabilidad ilimitado, ya que existen sistemas para los que no brinda información útil. Algunas limitaciones de la misma pueden ser salvadas usando una formulación geométrica del caos en los sistemas hamiltonianos [13].

C. Detalles del cálculo

La integración numérica de las ecuaciones del movimiento de Hamilton fue realizada mediante un algoritmo de Runge-Kutta de 4^{to} orden. El paso de tiempo empleado fue del orden de 10^{-3} ps, de manera que la energía se conservó con un error del orden de 10^{-5} cm⁻¹. Las energías analizadas, en su mayor parte, revisten solamente interés clásico, aunque se incluyeron también los niveles cuánticos vibracionales reportados en la literatura [27].

Para extraer la estructura del espacio de fases de los complejos, para las energías consideradas, construimos las superficies de sección de Poincaré tomando la coordenada de sección sobre el contorno de mínima energía. Fueron analizados los mapas (θ, p_θ) y (R, p_R) , y contienen, cada uno, más de 35000 puntos. Resultaron especialmente útiles las secciones en los planos (θ, p_θ) , pues como p_θ es el momentum conjugado a una coordenada angular, los conjuntos linealmente conexos en estas se

preservan casi idénticos a los formados si, conociendo el hamiltoniano no perturbado 0 para nuestro sistema, se realizase una transformación canónica a las variables angulares y de acción del mismo (hay un homeomorfismo "suave" entre los conjuntos que definen las secciones en ambos sistemas coordinados). Es precisamente en estas variables que frecuentemente se hace el estudio de los sistemas cuasi-integrables.

Los resultados fueron interpretados a partir de la *TPC* [29].

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La aparición simultánea, en las secciones de todos los complejos moleculares estudiados, de regiones de movimiento caótico y trayectorias regulares, nos permite asegurar que *no* es posible encontrar otra integral del movimiento en involución con el hamiltoniano de los mismos y clasificar dichos hamiltonianos, en un muy amplio intervalo de energías, como cuasi-integrables. En estos, las trayectorias regulares dependen discontinuamente de la elección de las condiciones iniciales, de manera que su presencia no implica la existencia de una integral aislante (invariante global) o simetría de los mismos.

Como es común en este tipo de sistemas, hallamos que la complejización del movimiento cerca de la separatriz se produce por el mecanismo de *solapamiento de resonancias* que tiende, en última instancia, a romper las curvas invariantes y conduce al régimen ergódico.

Como era de esperar, para energías por encima de la barrera de isomerización de cada uno de los complejos, se obtuvieron secciones no acotadas (*i.e.* Figura 1). Estas representan una sucesión de máximos y mínimos que reproduce la simetría de rotación de los sistemas¹, donde las regiones correspondientes a los mínimos en configuración lineal tienen una mayor amplitud que las de los mínimos en configuración T, pues la profundidad del pozo de potencial en esta última configuración es, en todos los casos, menor que en la primera. En este tipo de secciones, la conservación del área de las regiones en que se visualiza el movimiento, indica una propiedad general de los sistemas hamiltonianos: la conservación del volumen ocupado por el flujo en el espacio de fases.

¹La inclinación de las curvas invariantes viola *aparentemente* la simetría de los potenciales ($\theta = 0^\circ$ y $\theta = 90^\circ$ son planos de reflexión de los complejos moleculares estudiados). La anisotropía de estas curvas se debe al carácter anisotrópico de las condiciones ($p_\theta > 0$ y $p_R > 0$) impuestas para calcular los mapas. La inclinación específica se obtiene de un análisis de los signos en el sistema generado por (1) y estas últimas condiciones.

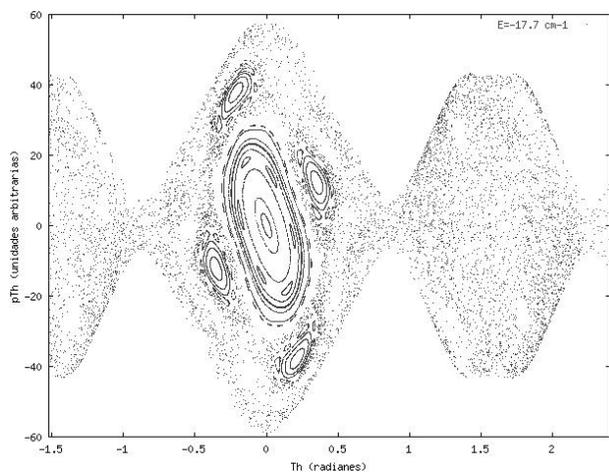


Figura 1. Sección no acotada correspondiente a la molécula HeBr_2 , para una energía por encima de la barrera de isomerización. Cadenas de islas de primer y segundo orden.

Para estas energías (por encima de la barrera de isomerización) se observa que en todos los casos la zona de movimiento estocástico se encuentra interconectada y ocupando una porción muy amplia de las secciones. La misma está constituida por la conjunción de la región en la configuración T y buena parte de la ligada al isómero lineal: ha ocurrido lo que se conoce como *transición global al régimen estocástico*. Dicha transición solamente tiene lugar en sistemas con una perturbación relativamente fuerte. No se encontraron trayectorias regulares que sean compartidas por ambos isómeros.

A medida que la energía disminuye, la porción de las secciones que corresponde al isómero lineal comienza a poblarse preferentemente de curvas invariantes, ocupando estas prácticamente todo el espacio accesible para los niveles cuánticos vibracionales reportados en [27], para el caso $\text{Gr} = \text{Ne}, \text{Ar}$ (Figuras 2 y 3) y para el He, en la región lineal por debajo de $E = -25.0 \text{ cm}^{-1}$.

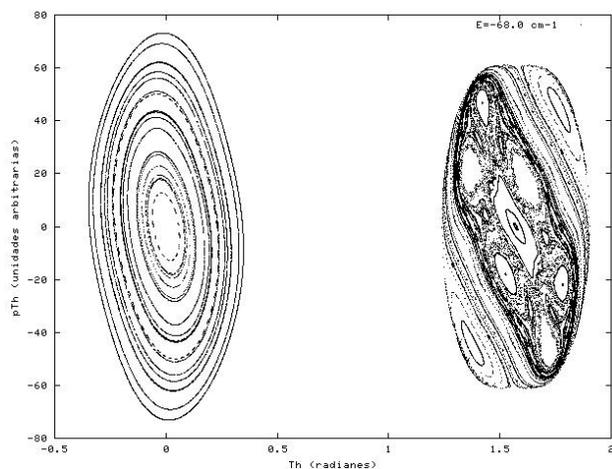


Figura 2. Sección correspondiente a la molécula NeBr_2 , para el nivel vibracional $\nu = 0$.

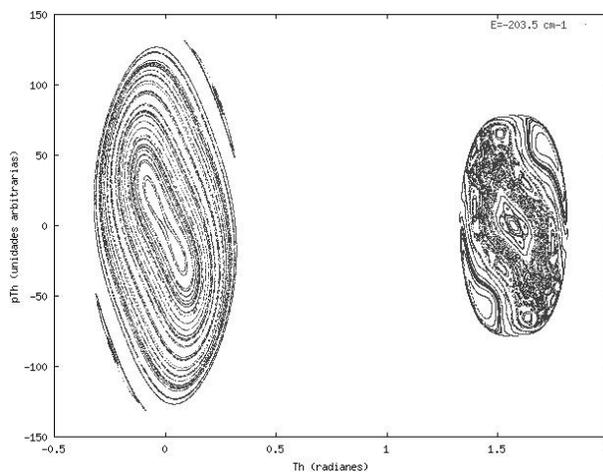


Figura 3. Sección correspondiente a la molécula ArBr_2 , para el nivel vibracional $\nu = 1$.

Un aspecto muy interesante es que, cuando el movimiento tiene lugar en la región de la configuración T, siempre se observan rasgos de una perturbación mucho más fuerte que aquella que puede asociarse a la región lineal que le corresponde (Figuras 1-3). Aunque este es un comportamiento general, el caso extremo lo constituye la molécula de HeBr_2 en la que, solamente para una energía muy próxima al fondo del pozo de potencial en dicha zona, $E = -39.0 \text{ cm}^{-1}$, se observaron unas pocas curvas invariantes ocupando una parte significativa de la sección (Figura 4). Para energías algo superiores el movimiento parece ser totalmente estocástico, observándose solo algunas regiones que semejan islas a punto de ser completamente destruidas. Por otra parte, incluso para $E = -39.0 \text{ cm}^{-1}$ (en el área de la sección correspondiente a la región T) se observan características de una perturbación relativamente fuerte [29]. Por ejemplo: la zona de movimiento estocástico forma una franja ancha interconectada sobre una gran porción del mapa alrededor de la separatriz y las cadenas de islas centrales; entre dichas islas sobresale una cadena de cinco islas primarias. Para esta energía se encontraron solo trayectorias regulares en la región de la configuración lineal.

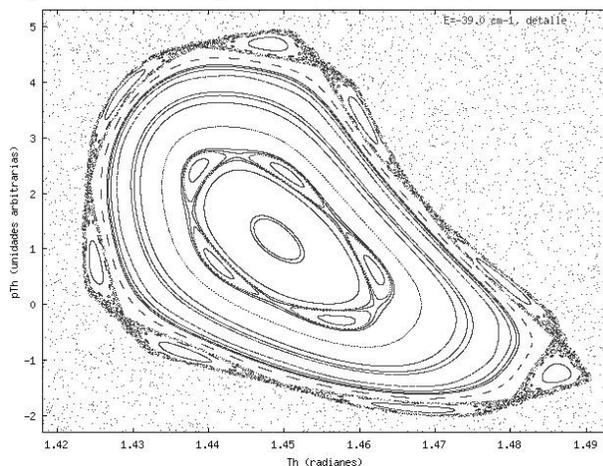


Figura 4. Acercamiento a la región regular en la sección de Poincaré correspondiente a la región de la configuración T en el caso del HeBr_2 , $E = -39.0 \text{ cm}^{-1}$.

Del análisis de la *anarmonicidad* de los mínimos correspondientes a cada configuración resultó que las dos regiones son comparables, de manera que la diferencia esencial no parece estar determinada por la dependencia con la variable R . Sin embargo, en el contorno de mínimo potencial fue observada una clara asimetría entre las perturbaciones en ambas configuraciones.

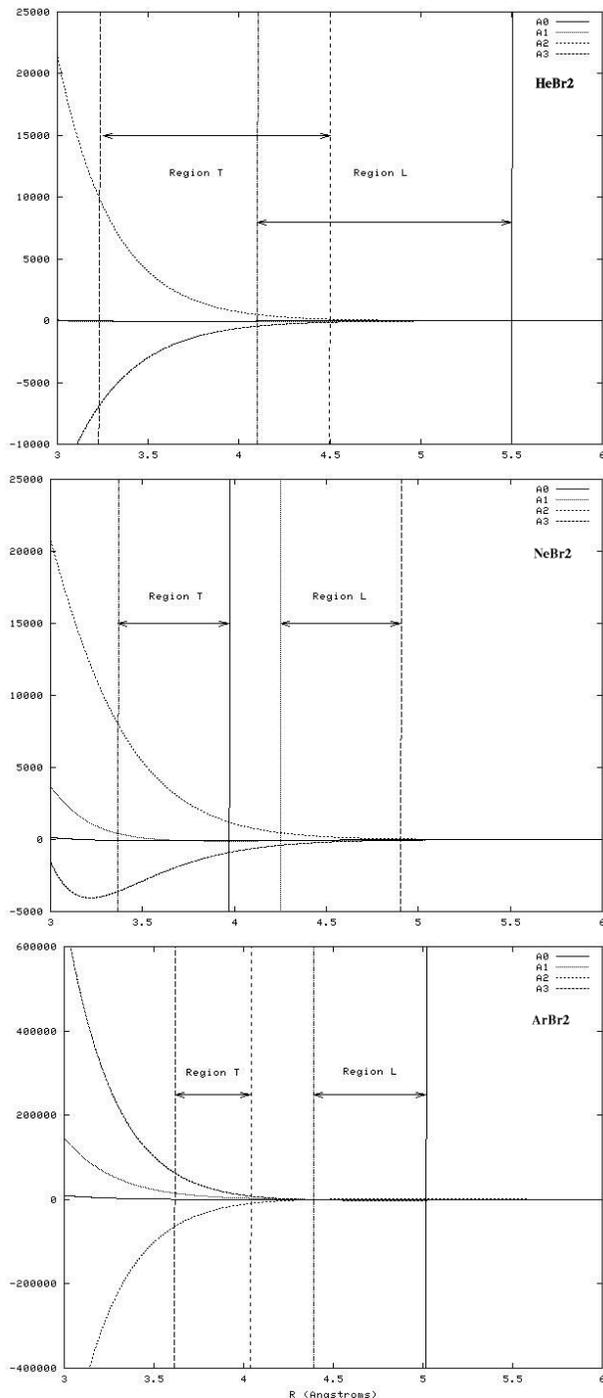


Figura 5. Coeficientes de ajuste del potencial por potencias del $\cos \theta$. $V(R, \theta) = A_0 + A_1 \cos^2 \theta + A_2 \cos^4 \theta + A_3 \cos^6 \theta$. (ver **anexo**). Extensiones en R de las regiones lineal y T para las energías $E = -17.7 \text{ cm}^{-1}$ (**HeBr₂**, $\nu = 0$), $E = -68.0 \text{ cm}^{-1}$ (**NeBr₂**, $\nu = 0$) y $E = -203.5 \text{ cm}^{-1}$ (**ArBr₂**, $\nu = 1$).

Al comparar las dos configuraciones en cuanto a la contribución de cada término en el ajuste del potencial, se observa que en la región T los términos de mayor orden son (para todos los casos y en varios órdenes de magnitud) mucho más importantes que aquellos de menor orden (Figura 5). Es decir, en todos los casos, la importancia relativa de los efectos no lineales de orden superior en el potencial es mucho mayor en configuración T que en configuración lineal.

En particular, para el **HeBr₂** podemos concluir además que, para energías algo superiores a $E = -39.0 \text{ cm}^{-1}$, la perturbación del hamiltoniano integrable más cercano en la configuración T es ya de una importancia tal, que se han roto prácticamente todas las curvas invariantes. Esto explica el carácter global del régimen estocástico que es observado.

Finalmente, de este análisis se deduce que ciertas combinaciones de los coeficientes de colocación (ver anexo) pueden ser empleadas como indicadores cualitativos, del grado de perturbación relativo entre las diferentes zonas del movimiento.

Un rasgo no deseado de la *SEP* para el **HeBr₂**

Al analizar la Figura 6 y la frontera de las secciones en un entorno de la configuración T (Figura 1), observamos un rasgo del potencial, que en un primer momento había pasado inadvertido, y que no está reportado en [27].

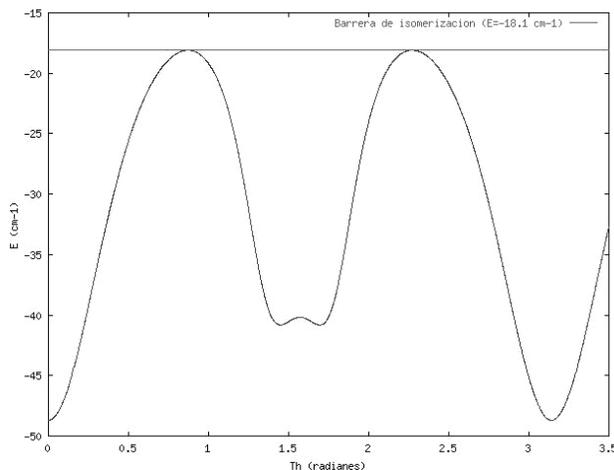


Figura 6. Potencial evaluado *sobre* el contorno de mínima energía para la molécula de **HeBr₂**. Topología inesperada de dos mínimos en el entorno de la configuración T.

El mínimo que debía² aparecer para $\theta = 90^\circ$, se comporta como un máximo local entre dos mínimos locales idénticos, simétricamente dispuestos en $\theta \approx 90.0 \pm 7.04^\circ$. La diferencia entre dichos mínimos del potencial y el máximo en $\theta = 90^\circ$ es $\delta E \approx 0.64 \text{ cm}^{-1}$. Aunque pequeña, es del orden de la distancia entre

²Estrictamente hablando, se desconoce el comportamiento del potencial en esta zona, pues no se reportan cálculos en la misma

los niveles de energía reportados en [27] para la corrección vibracional del estado electrónico básico y cambia, estrictamente hablando, la topología de la SEP.

Los autores de [27] coinciden con nosotros en atribuir estos rasgos *no deseados* del potencial a la pobre convergencia del método de colocación al tomar solamente cuatro ángulos diferentes, de manera que el método introduce dicho comportamiento anómalo en el potencial.

IV. CONCLUSIONES

En el espacio de fases de todos los sistemas bajo estudio se observó como característica más significativa la presencia simultánea de regiones regulares y otras de gran estocasticidad, lo que los clasifica como sistemas hamiltonianos cuasi-integrables. Se ha encontrado, entonces, que la TPC es el marco correcto para el estudio de los sistemas moleculares analizados (en el rango de energías que exploramos en este trabajo), permitiendo comprender los rasgos principales de las secciones obtenidas y establecer relaciones entre las regiones correspondientes a los isómeros lineal y T.

Se determinó que ciertas combinaciones algebraicas de los coeficientes de colocación contienen, al menos, información cualitativamente importante sobre el grado de perturbación de tales hamiltonianos.

Queda aún por determinar cuál podría ser la relación cuantitativa subyacente.

Como rasgo común a todos los sistemas, la perturbación es relativamente alta (régimen estocástico global) para las regiones correspondientes a la configuración T, incluso si el nivel de energía es próximo al fondo del pozo de potencial en la región. Dicha perturbación es relativamente pequeña para el caso del isómero lineal correspondiente (muestra principalmente estocasticidad local) y se incrementa gradualmente con el aumento de la energía. Como era de esperar, el sistema de comportamiento caótico más fuerte es el más ligero HeBr₂, mientras que los dos restantes exhiben un comportamiento similar entre sí.

El problema de la convergencia del método de colocación para el caso del HeBr₂ debe ser corregido (la anomalía en el potencial es incluso algo mayor que la diferencia entre los niveles energéticos reportados en [27] para los primeros dos estados vibracionales de la molécula).

AGRADECIMIENTOS

Deseamos agradecer al Prof. Pablo Villareal, del Consejo Superior de Investigaciones Científicas de Madrid, España; por las fructíferas discusiones sostenidas y sus valiosas sugerencias. Este trabajo ha sido respaldado por el proyecto PNAP/7/3, del Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas.

ANEXO A. Método de colocación

El método permite dar solución general a la siguiente clase de problemas de interpolación:

Problema. *Determinar cualquier valor de una función $\Gamma(\Sigma, \xi)$, si son conocidos los n valores que toma la misma en su dependencia con cierta variable ξ^3 , y que debe tener la misma simetría de una base de funciones $\Phi_m(\xi)$.*

Para realizar la interpolación tomando en cuenta este criterio, partimos de la suposición de que en el intervalo de variación analizado de la variable ξ es válido el desarrollo:

$$\Gamma(\Sigma, \xi) = \sum_{i=1}^n \Lambda_i(\Sigma) \Phi_i(\xi) \quad (\text{A.1})$$

siendo los $\Lambda_i(\Sigma)$ los coeficientes del desarrollo en la base deseada. Para los puntos ξ_j ($j = \overline{1, n}$), tenemos entonces:

$$\Gamma(\Sigma, \xi_j) = \sum_{i=1}^n \Lambda_i(\Sigma) \Phi_i(\xi_j); \quad j = \overline{1, n} \quad (\text{A.2})$$

que en notación matricial toma la forma⁴:

$$\begin{pmatrix} \Gamma(\Sigma, \xi_1) \\ \Gamma(\Sigma, \xi_2) \\ \vdots \\ \Gamma(\Sigma, \xi_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_1(\xi_1) & \Phi_2(\xi_1) & \cdots & \Phi_n(\xi_1) \\ \Phi_1(\xi_2) & \Phi_2(\xi_2) & \cdots & \Phi_n(\xi_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_1(\xi_n) & \Phi_2(\xi_n) & \cdots & \Phi_n(\xi_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_1(\Sigma) \\ \Lambda_2(\Sigma) \\ \vdots \\ \Lambda_n(\Sigma) \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

o de manera abreviada:

$$\Gamma = \Phi \Lambda \quad (\text{A.4})$$

Mediante una simple transformación en esta última expresión llegamos a:

³ Σ es una variable colectiva, en la que se incluyen otras posibles dependencias de la función analizada de manera que, en general, los valores pueden a su vez ser dependencias funcionales.

⁴A partir de este punto se hace evidente por qué debe truncarse el desarrollo en la serie hasta el n -ésimo vector de la base Φ_m .

$$\Lambda = \Phi^{-1}\Gamma \quad (\text{A.5})$$

El método consiste entonces en calcular las matrices Γ y Φ^{-1} , y mediante (A.5) encontrar los coeficientes Λ_i que luego son empleados para determinar $\Gamma(\Sigma, \xi)$ en cualquier punto ξ , usando la fórmula (A.1).

Entre las limitaciones fundamentales de este método se encuentran la necesidad de truncar el desarrollo en la base, puesto que Φ tiene que ser una matriz cuadrada y el problema de la inversión numérica de la citada matriz, la cual se dificulta a medida que disminuye el intervalo $\delta_i = \xi_{i+1} - \xi_i$ ($\Leftrightarrow \det \Phi \ll 1$).

Observación: En la Figura 4 de este trabajo se utilizaron en lugar de los coeficientes $V_{\lambda, Gr}$ que aparecen en (3), un conjunto de nuevos coeficientes A_k que se relacionan con aquellos mediante la transformación:

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 16 & -8 & 6 & -5 \\ 0 & 24 & -60 & 105 \\ 0 & 0 & 70 & -315 \\ 0 & 0 & 0 & 231 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_0 \\ V_2 \\ V_4 \\ V_6 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

de modo que del desarrollo en polinomios de Legendre se pasa a uno en potencias del $\cos \theta$.

REFERENCIAS

- [1] SMALLEY, R.E.; D.H. LEVY, and L. WHARTON (1976): **J. Chem. Phys.** 64, 3266.
- [2] ROHRBACHER, A.; N. HALBERSTADT and K.C. JANDA (2000): **Annu. Rev. Phys. Chem.** 51, 405.
- [3] BESWICK, J.A. and G. DELGADO-BARRIO (1980): **J. Chem. Phys.** 73, 3653.
- [4] SKENE, J.M.; J. C. DROBITS and M. I. LESTER (1986): **J. Chem. Phys.** 85, 2329.
- [5] EVARD, D.D. **et al.** (1988): **J. Chem. Phys.** 89, 2829.
- [6] PROSMITI, R.; P. VILLARREAL, G. DELGADO-BARRIO and O. RONCERO (2002): **Chem. Phys. Lett.** 359, 229.
- [7] JAHN, D.G.; S.G. CLEMENT and K.C. JANDA (1994): **J. Chem. Phys.** 101, 283.
- [8] GONZÁLEZ-LEZANA, T. **et al.** (1996): **J. Chem. Phys.** 105, 7454.
- [9] PROSMITI, R. **et al.** (2002): **J. Chem. Phys.** 117, 10019.
- [10] DAI, H.L. and R.W. FIELD, (1995): *Molecular dynamics and spectroscopy by stimulated emission pumping*, World Scientific, Singapore.
- [11] WYATT, R.E. and J.Z.H. ZHANG (1996): *Dynamics of molecules and chemical reactions*, Marcel Dekker, New York.
- [12] LOSADA, J.C.; J. M. ESTEBARANZ; R.M. BENITO and F. BORONDO (1998): **J. Chem. Phys.** 108, 63.
- [13] SOSPEDRA-ALFONSO, R.; L. VELÁZQUEZ and J. RUBAYO-SONEIRA (2003): **Chem. Phys. Lett.** 375, 261.
- [14] UZER, T. (1991): **Phys. Rep.** 199, 74.
- [15] SCHOFIELD, S. A.; P. G. WOLYNES and R.E. WYATT (1995): **Phys. Rev. Lett.** 74, 3720.
- [16] _____ (1996): **J. Chem. Phys.** 105, 940.
- [17] HERNÁNDEZ, M. I. **et al.** (2000): **J. Chem. Phys.** 113, 4620.
- [18] RONCERO, O. **et al.** (2001): **J. Chem. Phys.** 115, 2566.

- [19] JANHN, D. G. **et al.** (1996): **J. Chem. Phys.** 104, 3501.
- [20] STEVENS MILLER, A. E. **et al** (1999): **J. Chem. Phys.** 111, 7844.
- [21] BURROUGHS, A.; G. KERENKAYA and M.C. HEAVEN (2001): **J. Chem. Phys.** 115, 784.
- [22] NAUMKIN, F. YU. (1998): **J. Chem. Phys.** 226, 319.
- [23] RONCERO, O. **et al** (2001): **J. Chem. Phys.** 115, 6961.
- [24] HIGGINS, K.J.; F. M. TAO and W. KLEMPERER (1998): **J. Chem. Phys.** 109, 3048.
- [25] CHAN, K. W.; T.D. POWER; J. JAI-NHUNKNAN and S.M. CYBULSKI (1999): **J. Chem. Phys.** 110, 860.
- [26] CYBULSKI, S. M. and J. S. HOLT (1999): **J. Chem. Phys.** 110, 7745.
- [27] PROSMITI, R.; C. CUNHA; P. VILLARREAL and G. DELGADO-BARRIO (2002): **J. Chem. Phys.** 115, 9249.
- [28] PROSMITI, R.; P. VILLARREAL, and G. DELGADO-BARRIO (2002): **Chem. Phys. Lett.** 359, 473.
- [29] LICHTENBERG, A.J. and M.A. LIEBERMAN (1983): Regular and stochastic motion, Springer-Verlag, New York.
- [30] RAÑADA, A. (1990): Dinámica Clásica, Alianza Editorial, S. A., Madrid.
- [31] GUCKENHEIMER, J. and P.J. HOLMES (1983): Non-linear oscillations and bifurcations of vector fields, Springer-Verlag, New York.
- [32] KOLMOGOROV, A.N. (1954): Dokl. Akad. Nauk. SSSR 98, 527; ARNOLD, V. I. (1961): Izv. Akad. Nauk. SSSR, Ser. Math. 25, 21; MOSER, J. (1968): **Am. Math. Soc. Mem.** 81, 1.
- [33] POINCARÉ, H. (1899): Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste, Gauthier-Villars, Paris. (3 Vols.); BERRY, M. V. (1978): AIP Conf. Proc. 46, 16.

ON THE EFFECTIVE BEHAVIOR OF 3D POROUS CONDUCTIVE MATERIALS

A. León-Mecías^a, L. D. Pérez-Fernández^b, J. Bravo-Castillero^a and F. J. Sabina^c

^aFacultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, Ciudad de La Habana, Cuba

^bDepartamento de Ultrasonía, Instituto de Cibernética, Matemática y Física, Ciudad de La Habana, Cuba

^cInstituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y Sistemas, UNAM, México D. F., México

RESUMEN

Para estimar la conductividad efectiva de un material isotrópico poroso periódico lineal tridimensional por medio del Método de Homogeneización Asintótica, es necesario resolver los llamados problemas locales. Dado que el camino analítico directo usual resulta ser muy complejo, se adoptó una estrategia de elementos finitos. La conductividad efectiva estimada es comparada con finas cotas lineales disponibles que prueban su consistencia. Finalmente, por medio de un ejemplo ilustrativo, esta aproximación es aplicada al mejoramiento de cotas variacionales para compuestos no lineales, que resulta ser muy significativa para poros casi en percolación.

ABSTRACT

In order to estimate the effective conductivity of a 3D linear periodic porous isotropic composite via the Asymptotic Homogenization Method, it is required the so-called local problems to be solved. As the common direct analytical approach turns out to be quite complicated, a finite-element strategy is adopted. The estimated effective conductivity is compared to available fine linear bounds, proving to be consistent. Finally, by means of an illustrative example, this approximation is applied to the improvement of variational bounds for nonlinear porous composites, resulting to be remarkable for quasi-percolating pores.

INTRODUCTION

Derivation of the effective behavior of heterogeneous media starting on the geometrical and physical properties of the constituents has become a main subject in present-time research, which is confirmed by the increasing number of applications concerning reinforced composite materials [1, 2]. Such global behavior is described by means of the effective properties and, in this direction, two different approaches have arisen: asymptotic and variational procedures of homogenization [3, 4, 5], which, in fact, complement each other. The first of these approaches commonly yields closed-form approximations, while the second one results in bounds.

The first part of this paper deals with the application of the Asymptotic Homogenization Method (AHM) [3] in order to estimate the effective conductivity of a linear porous isotropic composite consisting in periodically distributed spherical voids in a solid isotropic matrix. Such estimation relies on the solution of the so-called local problems, for which, in this case, the Finite Element Method (FEM) [6] was employed. The AHM-FEM approximation is compared to available fine bounds [7], which proves the consistency of our prediction.

The second part of this paper is devoted to illustrate the application of the AHM-FEM result to the estimation of the effective behavior of nonlinear composites by means of an example. In this case, the application consists in improving some available nonlinear variational bounds [8].

STATEMENT OF THE AHM PROBLEM

It is our interest to study the effective conductivity $\hat{\varepsilon}$ of a linear periodic isotropic composite obtained by replicating a cell Q consisting in a solid isotropic cubic matrix containing a centered empty spherical inclusion. Without loss of generality, it can be assumed that Q has unit volume and is centered at the origin of an Oy_1, y_2, y_3 Cartesian coordinate system. It is convenient to denote the solid matrix and void inclusion phases by Q_M and Q_I , respectively, so $Q = Q_M \cup Q_I$.

It is well known that the differential equations which govern this problem have rapidly oscillating coefficients, so a direct analytical or numerical treatment is practically impossible. A successful alternative is to apply the AHM, from which a system of homogenized equations with smooth coefficients is obtained. Such averaged system, of which the

coefficients are the effective ones, models a homogeneous medium equivalent to the original one in the sense that they behave equally.

In order to obtain the mentioned effective coefficients, the so-called local problems, which come also as partial results from the application of the AHM, have to be solved. In this case, taking into account the symmetry of the cell [3], the local problem is stated in the first octant Q^+ of Q , as

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(\varepsilon_{ij}(y) \frac{\partial M_k(y)}{\partial y_j} \right) = 0, y \in Q_M^+ \quad (1)$$

$$M_k(y) = \frac{1}{2}, y \in \partial Q_M^+ \cap \left\{ y_1 = \frac{1}{2} \right\}$$

$$M_k(y) = 0, y \in \partial Q_M^+ \cap \left\{ y_1 = 0 \right\} \quad (2)$$

$$\left(\varepsilon_{ij}(y) \frac{\partial M_k(y)}{\partial y_j} \right) n_i = 0,$$

$$y \in \partial Q_1^+ \cup \left[\bigcup_{i=2}^3 (\partial Q_M^+ \cap \{y_i = 0\}) \right] \cup \left[\bigcup_{i=2}^3 (\partial Q_M^+ \cap \left\{ y_i = \frac{1}{2} \right\}) \right]$$

where $M_k(y) = N_k(y) + y_k$. The solutions $N_k(y)$ are 1-periodic functions in variable y . On the other hand, the AHM leads directly to the strong formulation of the local problems, so the effective conductivity tensor is given by

$$\hat{\varepsilon}_{ik} = \int_Q \left(\varepsilon_{ik}(y) + \varepsilon_{ij}(y) \frac{\partial N_k(y)}{\partial y_j} \right) dy \quad (3)$$

Due to the global isotropic behavior of the composite, it is sufficient to obtain

$$\hat{\varepsilon} = 2^3 \int_{Q^+} \varepsilon(y) \frac{\partial M_1(y)}{\partial y_1} dy \quad (4)$$

as $\hat{\varepsilon}_{ij} = \hat{\varepsilon} \delta_{ij}$ and $\varepsilon_{ij}(y) = \varepsilon(y) \delta_{ij}$ with $\varepsilon(y) = \varepsilon_M(\varepsilon(y) = 0)$ for $y \in Q_M(y \in Q_I)$. The formulation of the problem given above is consistent with the required formulation for the FEM simulation in the next section.

FEM simulation

FEM calculations were performed using 10-node tetrahedrons to construct the mesh of the geometrical

model Q_M^+ . The amount of needed elements varies with the inclusion concentration c_I , for instance for $c_I = 0.17$, a mesh with 966 elements was fine enough to represent accurately the geometry and to obtain accurate results, however, in order to avoid distorted elements for large c_I , a finer mesh was employed: the model for $c_I = 0.47$, was meshed using 10507 elements, as it is shown in Figure 1.

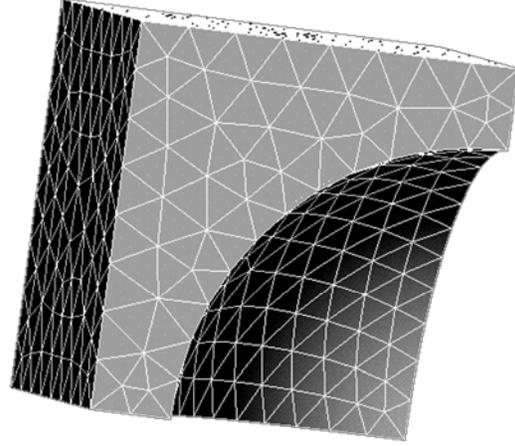


Figure 1. Mesh of Q^+ for $c_I = 0.47$.

For control purposes, the AHM-FEM results were compared to specialization of the linear bounds by Bruno [4] for the normalized effective conductivity $m = \frac{\hat{\varepsilon}}{\varepsilon_M}$ to our case, that is, $m(0)$ the effective conductivity of a matrix with unit conductivity containing void inclusions ($\varepsilon_I = 0$). Such comparison is shown in Figure 2 against c_I up to the percolation limit. The curves are labeled as follows: A subscript U or L indicates whether the curve is an upper or lower bound; a superscript B or H stands for ‘‘Bruno’’ or ‘‘Homogenization’’. It can be seen that the AHM-FEM estimate of m is closer to the upper bound, while significantly improves over the lower bound.

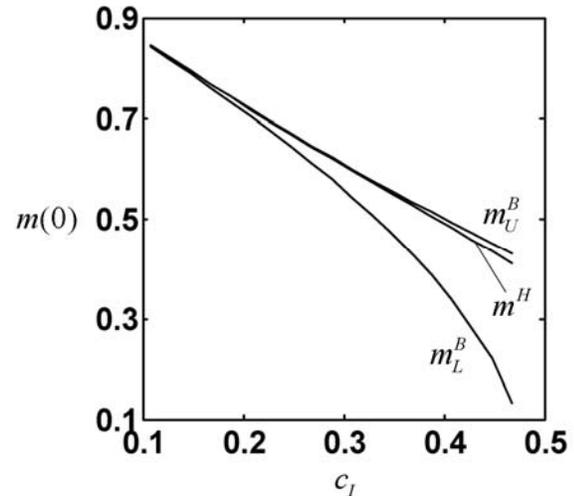


Figure 2. Plots of bounds and AHM-FEM estimate for the normalized effective conductivity.

Application to nonlinear composites

This section is devoted to the presentation of how the previously shown results are applied to a specific matter: the estimation of the effective behavior of nonlinear composites which is formally stated by means of the minimum energy principle as

$$\hat{W}(\bar{E}) = \inf_{E \in S(\bar{E})} \int_Q W(E, y) dy \quad (5)$$

where $S(\bar{E})$ is the set of self-equilibrated electric field with mean value \bar{E} , and

$$W(E, y) = W_M(E)f_M(y) + W_I(E)f_I(y) \quad (6)$$

is the constitutive potential describing the behavior of each phase. Here, the f 's are the characteristic functions of the phases. Consider, for motivation purposes, a material showing the microgeometry studied in the preceding sections, in which the matrix behaves according to the law [8, 9]

$$W_M(E) \equiv W_N(E) = \frac{1}{2} \varepsilon_N |E|^2 + \frac{1}{4} \gamma |E|^4, \quad \gamma > 0 \quad (7)$$

while $W_I \equiv 0$ as the inclusions are empty. The elementary upper and lower bounds are given by

$$\{\bar{W}^*\}^*(\bar{E}) \leq \hat{W}(\bar{E}) \leq \bar{W}(\bar{E}) \quad (8)$$

where the overbar and the asterisk stand for averaging and Legendre-transforming processes, respectively. It can be shown that in the case of porous materials the elementary lower bound is $\{\bar{W}^*\}^* \equiv 0$. As the matrix is nonlinear, the best bound available is a lower one requiring the use of a linear comparison composite with the same microgeometry as the nonlinear material. The matrix of such comparison material is described by the potential

$$W_0(E) = \frac{1}{2} \varepsilon_0 |E|^2 \quad (9)$$

while in this case the inclusions are voids. With this consideration, the lower bound reads

$$W_L(\bar{E}) = \frac{1}{2} \hat{\varepsilon}_0 |\bar{E}|^2 + c_M \min_E (W_M - W_0)(E) \quad (10)$$

where $\hat{\varepsilon}_0$ is the effective conductivity of the linear comparison composite depending on the conductivity ε_0 of the matrix. Note that an estimate or lower bound for $\hat{\varepsilon}_0$ is required to be available. For the particular nonlinear law consider here, the bound specializes to

$$\hat{W}_L(\bar{E}) = \frac{1}{2} \hat{\varepsilon}_0 |\bar{E}|^2 - \frac{1}{2} c_M \frac{(\varepsilon_N - \varepsilon_0)^2}{\gamma} \quad (11)$$

Now, this bound can be maximized with respect to ε_0 , that is, choosing the comparison material which provides the best bound \hat{W}_L . Consider now a linear homogeneous medium with potential W_{LN} characterized by the same conductivity ε_N as the matrix of the nonlinear composite. Then, normalization and optimization of \hat{W}_L yields

$$\frac{\hat{W}_L}{W_{LN}}(\bar{E}) = m(0) \left(\frac{m(0) \gamma |\bar{E}|^2}{2c_M \varepsilon_N} + 1 \right) \quad (12)$$

where $m(0) = \frac{\hat{\varepsilon}_0}{\varepsilon_0}$. From the normalization of the elementary upper bound

$$\frac{\bar{W}}{W_{LN}}(\bar{E}) = c_M \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\gamma |\bar{E}|^2}{\varepsilon_N} \right) \quad (13)$$

In Figure 3, plots of the normalized elementary upper bound and the lower bound by Ponte Castaneda are presented for $c_1 = 0.47$ near percolation against a parameter involving all the information about the nonlinear behavior. The curves are labeled as follows: a subscript U or L indicates whether it is an upper or a lower bound; a superscript E stands for an elementary bound; while a superscript B or H specifies the method used for the normalized effective conductivity $m(0)$, that is, the lower bound by Bruno (1991) or the homogenization AHM-FEM procedure presented in the previous section. Note that, for c_1 near percolation, the improvement provided by using the AHM-FEM method is remarkable.

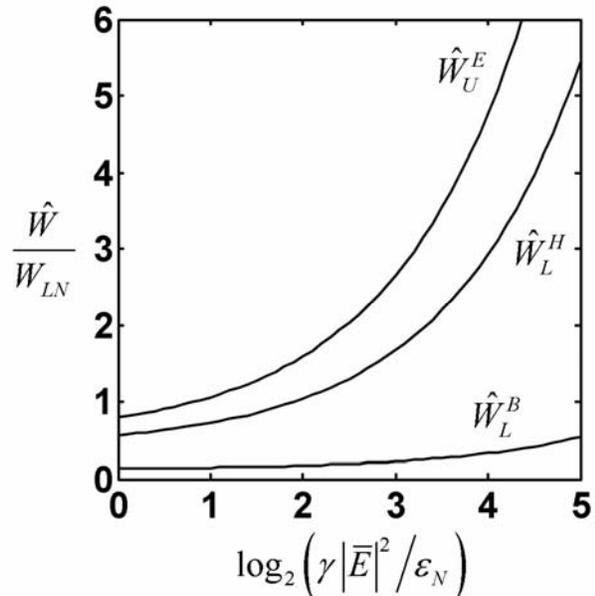


Figure 3. Plots of normalized bounds for $c_1 = 0.47$.

improvement is obtained for concentrations near percolation.

CONCLUDING REMARKS

In this paper, the effective conductivity of a linear porous composite was obtained by means of the AHM. The local problems were solved using a FEM strategy. A comparison of the AHM-FEM results with available bounds is carried out, yielding in consistency and improvement of accuracy of the estimation for large concentrations of the empty inclusion. Finally, an application to a particular nonlinear case has revealed that remarkable

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by projects DGAPA-UNAM 101705 and CITMA PNCB IBMFQC 09-2004. The authors are also grateful to Departamento de Matemáticas y Mecánica, IIMAS-UNAM. ALM wishes to thank Red de Macrouiversidades de América Latina y el Caribe for granting one of their scholarships.

REFERENCES

1. MILTON, G.W. (2002): The Theory of Composites. Cambridge University Press.
2. TORQUATO, S. (2002): Random Heterogeneous Materials. Microstructure and Macroscopic Properties. Springer.
3. BAKHVALOV, N. and G. PANASENKO (1984): Homogenisation: Averaging Processes in Periodic Media. Kluwer Academic Publishers.
4. BENSOUSSAN, A.; J.L. LIONS and G. PAPANICOLAOU (1978): Asymptotic Analysis for periodic Structures, North Holland.
5. HASHIN, Z. and S. SHTRIKMAN (1962): **J. Appl. Phys.** 33, 3125.
6. ZIENKIEWICZ, O.C. (1977): The Finite Element Method in Engineering Science. McGraw-Hill Publishing Company.
7. BRUNO, O.P. (1991): **Proc. R. Soc. Lond.** A 443, 353.
- 8.. TALBOT, D.R.S. (1999): **Proc. R. Soc. Lond.** A 455, 3617.
9. PÉREZ-FERNÁNDEZ, L.D.; A. LEÓN-MECÍAS and J. BRAVO-CASTILLERO (2005): **Mat. Letters** 59, 1552.

NUEVA FORMULACIÓN DEL PRINCIPIO DE HUYGENS PARA ONDAS PLANAS

Julio A. Romero*, Centro de Estudios para la Educación Superior (CEPES), Universidad de La Habana, Cuba
Luis Hernández**, Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba

RESUMEN

En el presente artículo se presenta una nueva formulación matemática del Principio de Huygens para ondas planas, el cual es descrito a través de una ecuación vectorial integral. Se demuestra que las soluciones de los problemas que pueden plantearse con la nueva formulación satisfacen la ecuación homogénea de Helmholtz. Una expresión para la densidad de energía de las ondas emitidas por las fuentes secundarias es obtenida. Para ilustrar la nueva formulación se realiza el cálculo exacto de la intensidad de la luz difractada por una abertura circular a lo largo del eje perpendicular a su centro, encontrándose una ecuación analítica exacta que describe la intensidad de la onda difractada. A continuación se hace un análisis comparativo entre los resultados aquí obtenidos y los correspondientes a la teoría de Fresnel. Se realiza un análisis similar para una placa zonal.

Palabras clave: Principio de Huygens, ondas planas, Teoría de Fresnel.

ABSTRACT

The article presents results corresponding to a new mathematical formulation of Huygens' Principle for plane waves which is described by a vectorial integral equation. We showed that the solutions of the integral equation fulfill the Helmholtz's equation. Subsequently the density of energy of the secondary waves was determined. The task is illustrated by the diffraction due to a circular aperture. We found an exact analytical equation that describes relative intensity of the diffracted light as a function of the distance from the center of the circular aperture. For the first maxima and minima, the intensity behavior is similar to the one predicted by Fresnel's theory. However, for distances near to the aperture, the difference is remarkable. An extension of the theory is made to study the diffraction through the zonal plates. It must also be pointed out that contrary to previous methods; the present formulation is dealt with a vectorial analysis without recurring to any approximations.

Key words: Huygens' Principle, plane waves, Fresnel theory.

INTRODUCCIÓN

Christiaan Huygens dio a conocer el principio que lleva su nombre en 1678, y puede decirse, que este principio le debe mucho a la confianza que depositó su autor en la teoría ondulatoria de la luz. Pero no sería hasta el año 1818, que Augustin Jean Fresnel planteara una fórmula matemática para hacer un uso cuantitativo de este principio.

La aproximación escalar, para explicar la luz difractada a través de las integrales de Fresnel-Kirchhoff, es relativamente simple y una herramienta muy útil para describir la propagación de la luz coherente. Con esta aproximación es posible resolver un buen número de problemas actuales de la óptica con un significado físico real. Sin embargo, la aproximación de Fresnel está restringida a la difracción bajo pequeños ángulos donde es excluida la naturaleza vectorial del campo eléctrico, la cual hay que tener en cuenta cuando la difracción ocurre bajo grandes ángulos.

La difracción que tiene lugar a través de una abertura circular iluminada por una onda convergente ha recibido especial atención durante años [1]. Por supuesto, un problema particular puede ser resuelto mediante métodos numéricos pero las teorías simplificadas impiden entender las tendencias y predecir comportamientos. Partiendo de la teoría simple de Debye [2] varias mejoras han sido introducidas al estudio de la difracción que incluye la extensión a sistemas ópticos de gran apertura [3], considerar los efectos de la polarización [4] y sistemas ópticos con un número finito de zonas de Fresnel [5]. Por otra parte, recientemente se han publicado varios trabajos que estudian la aproximación de Fresnel para el cálculo de la intensidad difractada fuera del eje de simetría [6.7]. Sin embargo, en todos estos trabajos se utiliza la aproximación escalar.

En un trabajo preliminar anterior [8] presentamos una nueva formulación matemática del Principio de Huygens para ondas planas, el cual es descrito

E-mail: *julioarr@cepes.uh.cu
**luisman@ff.oc.uh.cu;

mediante una ecuación vectorial integral. Hemos demostrado que las soluciones de los problemas que pueden plantearse con la nueva formulación satisfacen la ecuación homogénea de Helmholtz y las condiciones de Sommerfeld. En el presente trabajo se reporta una expresión para la densidad de energía de las ondas emitidas por las fuentes secundarias. Para ilustrar la nueva formulación se realiza el cálculo exacto de la intensidad de la luz difractada por una abertura circular a lo largo del eje perpendicular a su centro, encontrándose una ecuación analítica exacta que describe la intensidad de la onda difractada. Para los primeros máximos y mínimos de intensidad de la luz difractada, su comportamiento es idéntico al predicho por la teoría de Fresnel, sin embargo para distancias cercanas a la abertura su diferencia es sustancial. La teoría también es utilizada para el estudio de las placas zonales encontrándose que la posición de los máximos no se altera, pero si el ancho medio de los picos. Igualmente se observa el efecto de la difracción disminuyendo la intensidad de los máximos al acercarnos al plano de la placa zonal.

2. ECUACIÓN INTEGRAL

Aplicando la segunda fórmula de Green a un dominio en forma de pirámide recta de base circular de altura R y pasando al límite cuando el radio de la base del cono tiende a infinito, se obtiene una función escalar acotada, continuamente derivable y que es además solución de la ecuación homogénea de Helmholtz. Esta función toma la forma de:

$$F(A, E) = -\frac{ERe^{\pm ikR}}{2\pi} \int_A \frac{\partial}{\partial r'} \left(\frac{e^{\mp ikr'}}{r'} \right) \frac{ds'}{r'} \quad (2)$$

$$f(\text{plano}, E) = E \quad (3)$$

En la relación, $f(A, E)$ es el valor de la función escalar en el punto p que se encuentra situado a una distancia $R > 0$ del plano de integración, A es el área de integración sobre el plano y r' es la distancia entre el punto p y cualquier punto p' del área de integración. Integrando sobre todo el plano se obtiene la relación 3.

3. PRINCIPIO DE HUYGENS

Se considera un régimen estacionario de ondas electromagnéticas planas monocromáticas y un medio homogéneo, isótropo y lineal; además el frente de onda plano con fase α en el instante inicial se encuentra a la distancia R de un punto p y a partir de dicho instante se mueve acercándose al punto en cuestión. Colocando el origen de coordenadas del sistema de referencias en dicho punto, entonces, el vector del campo eléctrico de la onda plana monocromática, viene dado por:

$$\vec{E}(z, t) = \vec{E}_0 e^{i(\omega t + k(z-R) + \alpha)} \quad (4)$$

El vector del campo eléctrico en el punto p , se obtiene evaluando en $z = 0$. Teniendo en cuenta el carácter transversal de las ondas electromagnéticas, asumiendo que $E_p(t)$ representa cualquiera de las componentes transversales y que E_0 es su amplitud correspondiente, se tiene:

$$E_p(t) = E_0 e^{i(\omega t - kR + \alpha)} \quad (5)$$

Sustituyendo E en la ecuación 2 por la relación 5, el valor de cada componente transversal del vector del campo eléctrico se obtiene integrando 2 por todo el plano $z = R$. Para determinar la componente z del vector del campo eléctrico de las ondas secundarias, se asume que éstas son también transversales. Considerando lo expresado anteriormente y el hecho de que el origen de coordenadas del sistema de referencia no tiene que coincidir con el punto donde se está evaluando el vector del campo eléctrico, se llega a una ecuación vectorial relevante, que es la base de la nueva formulación del Principio de Huygens para las ondas planas:

$$d\vec{E}(\vec{r}', \vec{r}, t) = (d\vec{s}' \times \vec{E}_p(t)) \times \frac{\vec{r}' - \vec{r}}{|\vec{r}' - \vec{r}|} \frac{\partial}{\partial |\vec{r}' - \vec{r}|} \left(\frac{e^{\mp ik|\vec{r}' - \vec{r}|}}{2\pi|\vec{r}' - \vec{r}|} \right) \quad (6)$$

donde

$$\vec{E}_p(t) = \vec{E}_0 e^{\pm i(\omega t + \alpha)} \quad (7)$$

El vector del campo eléctrico dado por la ecuación 7 corresponde al campo de una onda plana en el punto de observación, y en general, tomará una u otra forma en función de las condiciones de contorno del problema de difracción específico que se considere. Es fácil comprobar que la integral de la ecuación 6 para cualquier área A del plano de difracción satisface la ecuación homogénea de Helmholtz.

4. ONDAS SECUNDARIAS

A partir de la ecuación 6 y considerando esféricos los frentes de ondas secundarios, la densidad de energía de las ondas esféricas secundarias viene dada por:

$$W = \frac{\varepsilon |\vec{E}_0(t)|^2}{8\pi^2 \Gamma^2} \left(k^2 + \frac{1}{r^2} \right) (1 + \cos^2(\phi)) \quad (8)$$

En esta última ecuación Γ es el número de fuentes secundarias por unidad de área, ε es la constante dieléctrica del medio y ϕ es el ángulo que forma la dirección de propagación de la onda esférica secundaria con la dirección de propagación de la onda plana, como puede apreciarse en la Figura 1.

En la ecuación puede observarse que existe simetría axial respecto a la dirección de propagación de la onda plana, además, la densidad de energía de las ondas secundarias disminuye con ϕ y con $1/r^2$.

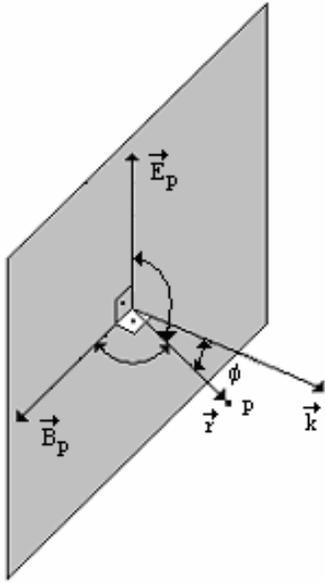


Figura 1. Esquema referido a la ecuación 8, para describir la propagación de las ondas secundarias. El ángulo que forman los vectores \vec{k} y \vec{r} es ϕ .

5. DIFRACCIÓN POR UNA ABERTURA CIRCULAR

Supongamos que tenemos una onda plana monocromática incidiendo de forma normal sobre un plano opaco dotado de una abertura circular de radio ρ_0 . Coloquemos el origen de coordenadas O sobre el centro de la abertura y tomemos el eje z en la dirección y sentido de propagación de la onda, como muestra la Figura 2.

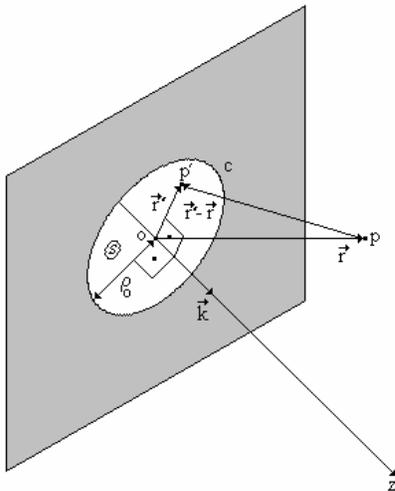


Figura 2. Pantalla opaca con una abertura circular de radio ρ_0 .

El vector del campo eléctrico de la onda difractada se determina integrando la ecuación 6 por el área de la abertura circular:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{-1}{2\pi} \left[\hat{e}_z (\bar{\rho}_0 \vec{E}_p(t)) l_1 + z \vec{E}_p(t) l_2 \right] \quad (9)$$

donde $\vec{E}_p(t) \perp \hat{e}_z$ $\bar{\rho}_0 = \rho_0 \frac{\vec{r}'}{r'}$ $\vec{k} = k \hat{e}_z$ $r^2 = \rho^2 + z^2$

$$l_1 = 2 \int_0^\pi \frac{e^{\mp i k \sqrt{\rho_0^2 + r^2 - 2\rho_0 \rho \cos(\psi)}}}{\sqrt{\rho_0^2 + r^2 - 2\rho_0 \rho \cos(\psi)}} \cos(\psi) d\psi \quad (10)$$

$$l_2 = 2 \int_0^\pi \int_r^{\sqrt{\rho_0^2 + r^2 - 2\rho_0 \rho \cos(\psi)}} \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{e^{\mp i k R}}{R} \right) \left(1 + \frac{\rho \cos(\psi)}{\sqrt{R^2 - r^2 + \rho^2 \cos^2(\psi)}} \right) dR d\psi \quad (11)$$

Las ecuaciones 9-11 permiten expresar un resultado analítico para la intensidad relativa I/I_0 de la onda difractada a lo largo del eje de simetría axial de la abertura:

$$\frac{I}{I_0} = 1 + \frac{z^2}{z^2 + \rho_0^2} - \frac{2z}{\sqrt{z^2 + \rho_0^2}} \cos \left(k \left(\sqrt{z^2 + \rho_0^2} - z \right) \right) \quad (12)$$

En la Figura 3 puede verse representado los gráficos de intensidad relativa dados por la ecuación 12 en función de la distancia para una longitud de onda $\lambda = 633 \text{ nm}$ y $\rho_0 = 1 \text{ mm}$, valores que se toman como ejemplo para ilustrar los resultados. Obsérvese que para valores de $z \gg \rho_0$ la ecuación 12 se reduce a la expresión clásica de acuerdo a la teoría de Fresnel:

$$I = 2I_0 \left(1 - \cos \left[\frac{k\rho_0^2}{2z} \right] \right) \quad (13)$$

De tal manera que la posición de los máximos y los mínimos a lo largo del eje coincide con los predichos por la teoría de Fresnel para los primeros órdenes. Para distancias cercanas o menores al valor de $z = \rho_0$, la diferencia entre los resultados que se obtienen a partir de la ecuación 12 y la teoría de Fresnel (ecuación 13) se hacen evidentes, como se muestra en la Gráfica 3. Este hecho puede también observarse en la forma analítica de las envolventes de la ecuación 12:

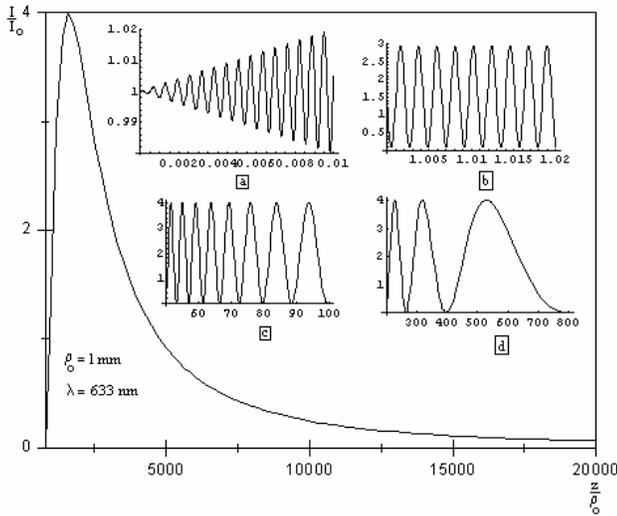


Figura 3. Intensidad relativa de la luz difractada en función de la distancia al centro de la abertura. La figura principal muestra el máximo de primer orden en tanto las gráficas insertadas revelan el comportamiento para otros valores de z/ρ_0 .

$$\left(1 - \frac{z}{\sqrt{z^2 + \rho_0^2}}\right)^2 \leq \frac{I}{I_0} \leq \left(1 + \frac{z}{\sqrt{z^2 + \rho_0^2}}\right)^2 \quad (14)$$

Estas últimas se obtienen directamente de la ecuación 12 bajo las condiciones:

$$k(\sqrt{z^2 + \rho_0^2} - z) = 2n\pi$$

$$k(\sqrt{z^2 + \rho_0^2} - z) = (2n+1)\pi$$

$$n \leq \frac{\rho_0}{\lambda} \quad (15)$$

Para $\rho_0 \ll z$, estas se convierten en las condiciones de mínimo y máximo respectivamente, de la teoría de Fresnel:

$$z \approx \frac{\rho_0^2}{2n\lambda} \quad z \approx \frac{\rho_0^2}{\lambda(2n+1)} \quad (16)$$

6. DIFRACCIÓN POR UNA PLACA ZONAL

Considerando una placa zonal, un juego de $n+1$ anillos concéntricos que se alternan entre opacos y transparentes (ver Figura 4) e integrando la ecuación 6 por el área de los anillos transparentes se obtiene, a lo largo del eje de simetría axial, una expresión para el vector campo eléctrico de la onda difractada por la placa zonal, a saber:

$$\vec{E}(z,t) = z\vec{E}_p(t) \sum_{l=0}^{2n+1} \frac{(-1)^l e^{\mp i k \sqrt{\rho_l^2 + z^2}}}{\sqrt{\rho_l^2 + z^2}} \quad (17)$$

donde ρ_l son los radios de los anillos. La intensidad relativa para un número de anillos $n+1$ viene ahora dada por:

$$\frac{I}{I_0} = \sum_{l=0}^{2n+1} \frac{(-1)^{l+j} z^2 \text{Cos}(k(w_l - w_j))}{w_l - w_j} \quad (18)$$

donde
$$w_l = \sqrt{\rho_l^2 + z^2} \quad (19)$$

La relación que guardan los radios de los anillos ρ_l con la posición del máximo principal z_0 se obtiene de la ecuación 18:

$$\rho_l^2 = \left(\frac{1\lambda}{2}\right)^2 + \rho_0^2 + l\lambda\sqrt{z_0^2 + \rho_0^2} \quad 0 \leq l \leq 2n+1 \quad (20)$$

Para el caso de $\rho_0 = 0$, tomando $x = z/z_0$, $y = \lambda/z_0$, sustituyendo en 19 y redefiniendo w_l se obtiene:

$$w_l = \sqrt{\left(\frac{1\lambda}{2}\right)^2 + ly + x^2} \quad 0 \leq l \leq 2n+1 \quad (21)$$

Teniendo en cuenta estos últimos cambios, la ecuación 18 se transforma en la siguiente relación:

$$\frac{I}{I_0} = \sum_{l=0}^{2n+1} \frac{(-1)^{l+j} z^2 \text{Cos}(k(w_l - w_j))}{w_l w_j} \quad 0 \leq l \leq 2n+1 \quad (22)$$

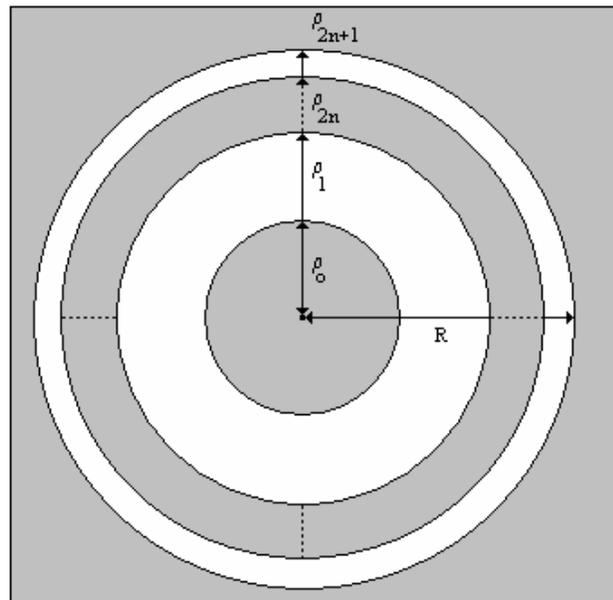


Figura 4. Croquis de la placa zonal.

Evaluando la ecuación 21 se obtiene la intensidad de la onda difractada por la placa zonal a lo largo del eje axial en función del número de anillos. La Figura 5 muestra esta dependencia para $\lambda = 633 \text{ nm}$ y una posición del máximo principal fijada en 100 mm. Obsérvese que los máximos se van estrechando en la medida que el número de anillos se incrementa pero que no cambian de posición, mostrando como era de esperarse un comportamiento análogo a una red de difracción. Nótese también en la Figura 5-d que los máximos de intensidad disminuyen su valor en la medida que su posición se acerca a la placa zonal.

7. CONCLUSIONES

Encontrada una función escalar (ecuación 2) y sobre la base de las características propias de las ondas electromagnéticas en medios homogéneos, isotrópicos y lineales, se obtuvo por primera vez la ecuación vectorial (6), consecuente con el Principio de Huygens. Esta ecuación vectorial describe correctamente la propagación de los frentes de ondas planos en el medio en cuestión, en plena concordancia con dicho principio. Se demostró que las soluciones de los problemas que pueden plantearse con su ayuda, satisfacen la ecuación homogénea de Helmholtz, como corresponde a regímenes estacionarios.

Las condiciones iniciales y de contorno, para los problemas que pueden plantearse con la ayuda de esta nueva formulación del Principio de Huygens, se establecen por medio de la ecuación 7 y por la integral de esta última por el área correspondiente al problema en cuestión. También se satisfacen las condiciones de Sommerfeld, garantizándose de esta forma la unicidad del problema tratado.

Por otro lado, partiendo de la nueva formulación y considerando esféricos los frentes de ondas de las fuentes secundarias, se obtuvo una expresión para la densidad de energía espacial de las ondas secundarias (ecuación 8), realizándose un análisis del comportamiento de esta función.

Al considerar los casos de la placa zonal y de la abertura circular, se demostró que con la ayuda de esta nueva formulación puede llegarse a resultados analíticos exactos, demostrándose de esta forma su sencillez. En los casos considerados como ejemplos se obtuvieron de forma exacta las intensidades de los campos eléctricos. Se hizo un análisis de la forma funcional de estos campos y se compararon los resultados con los de la teoría de Fresnel. Los resultados válidos de la vieja formulación de Fresnel fueron corroborados, en tanto que se obtuvieron nuevos resultados más acorde a la realidad en los casos donde la teoría de Fresnel falla en sus predicciones.

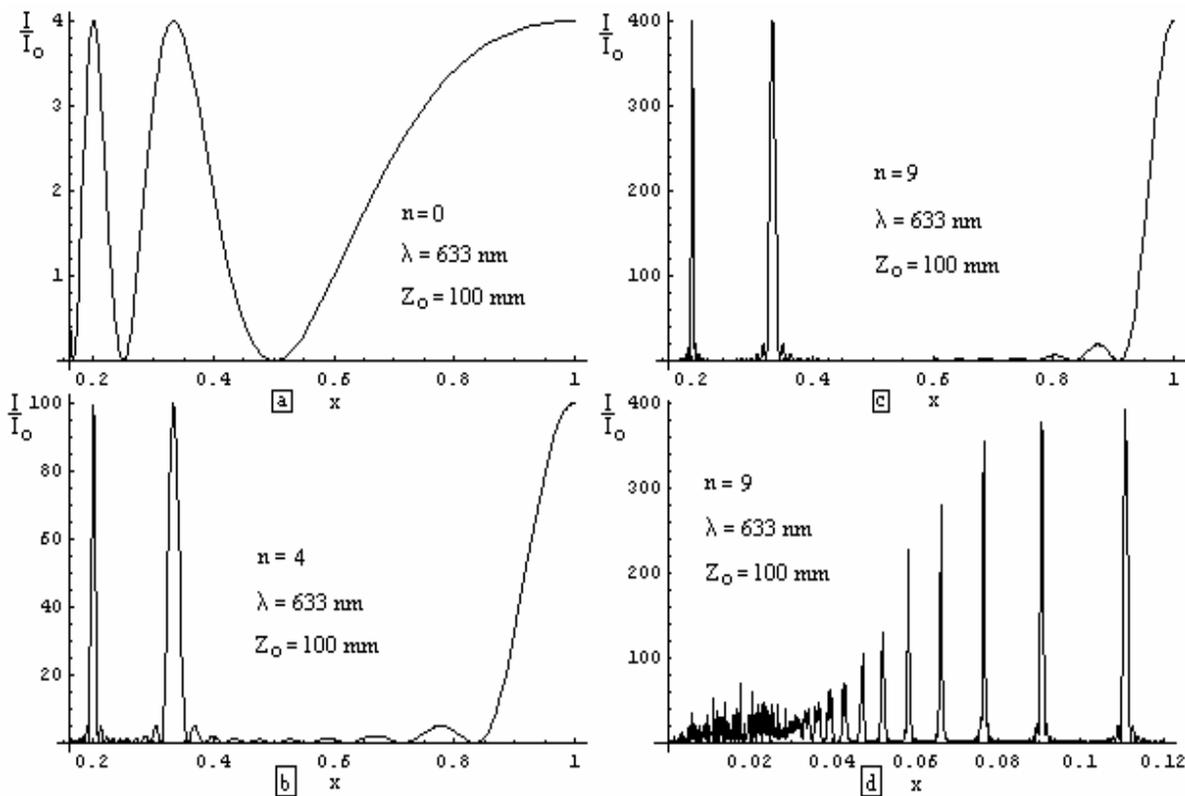


Figura 5. Las gráficas muestran la dependencia de la intensidad en función de la posición ($x = z/z_0$, siendo z_0 la posición del máximo principal). (a) Para una abertura circular, (b) para cuatro anillos, (c) para nueve anillos. En la figura (d) se observa el patrón para distancias cercanas a la placa zonal para nueve anillos, en donde los máximos disminuyen su valor.

REFERENCIAS

- [1] STAMNES, J.J. (1986): "Waves in focal regions". Hilger, Bristol.
- [2] BORN, M. and E. WOLF (1983): "Principles in Optics" 6th ed. Pergamon, Oxford.
- [3] HOPKINS, H.H. (1943): "The Airy disc formula for systems of high relative aperture". **Proc. Phys. Soc. London** 55, 116.
- [4] RICHARDS, B. and E. WOLF (1959): "Electromagnetic diffraction in optical systems". **Proc. R. Soc. London, Ser. A** 253, 358.
- [5] LI, Y. and E. WOLF (1984): "Three-dimensional intensity distribution near the focus in systems of different Fresnel numbers", **J. Opt. Soc. Am.** A1, 801.
- [6] MIELENZ, KLAUS D. (1998): "Algorithms for a Fresnel Diffraction at Rectangular and Circular Apertures", **J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.** 103, 497.
- [7] SHEPPARD, C.I.R. and I.I. COOPER (2004): "Fresnel diffraction by a circular aperture with off-axis illumination and its use in deconvolution of microscope images", **J. Opt. Soc. Am.** A21, 540-545.
- [8] ROMERO, J.; O. CALZADILLA y L. HERNÁNDEZ (2000): "Principio de Huygens para las ondas planas monocromáticas y difracción por una abertura circular", **Revista Cubana de Física** 17, 10.

ANÁLISIS DE SEMEJANZA EN LAS ASOCIACIONES MOLECULARES DE LA AMILOSA CON ALGUNOS COMPUESTOS ORGANOLÉPTICOS

Elsa Sánchez-García y Luis A. Montero*

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

RESUMEN

En el presente trabajo se realiza un análisis de semejanza de estructuras moleculares, con vistas a escoger el mejor valor límite del coeficiente de Tanimoto. Se desea obtener los mejores valores de propiedades termodinámicas basadas en consideraciones estadísticas correspondientes a asociaciones moleculares en sistemas formados por la amilosa y algunos compuestos organolépticos como el eugenol demetilado, el linalol, la vainillina y el benzoato de bencilo. El análisis de semejanza se usa con el fin de evitar estructuras redundantes en simulaciones que parten de estructuras aleatorias "a priori". Tales redundancias provocan desviaciones no deseadas en los valores de las funciones de partición y afectan la calidad de las simulaciones si no se eliminan adecuadamente. Para simular el comportamiento de la amilosa se utilizó la dextrina formada por tres unidades de α 1,4 -glucosa. Se demostró que para estos sistemas el valor idóneo de discriminación de Tanimoto es 0.95. Esto se debe a que, aunque los valores de las funciones termodinámicas de asociación no difieren si se trabaja con $T = 0.85$ o con $T = 0.95$, con el primero se consideran como iguales celdas que en realidad son diferentes, lo cual se debe a las múltiples posibilidades de ordenamientos espaciales diferentes en la molécula de dextrina estudiada.

ABSTRACT

In the present work an analysis of similarity of molecular structures is made, with views to choose the best value limit of the coefficient of Tanimoto. It is desired to obtain the best values of thermodynamic properties based on statistical considerations corresponding to molecular associations in systems formed by the amilosa and some organolépticos compounds like eugenol demetilado, linalol, the vainillina and the benzoate of bencilo. The similarity analysis is used with the purpose of avoiding redundantes structures in simulations that leave from random structures "a priori". Such redundancies cause deviations wished in the values of the partition functions and affect the quality of the simulations if they are not eliminated suitably. In order to simulate the behavior of the amilosa the dextrin formed by three units was used of α 1,4 - glucose, obtaining that for these systems the suitable value of coefficient of Tanimoto is 0.95. This must to that, although the values of the thermodynamic functions of association do not differ if works with $T = 0.85$ or $T = 0.95$, with first are considered like equal cells that in fact are different, which must to the multiple possibilities of space orderings different in the studied dextrin molecule.

INTRODUCCIÓN

La amilosa es un polisacárido formado por varias unidades de α 1,4 -glucosa que constituye un importante soporte cromatográfico y ha sido objeto de diferentes estudios debido, entre otras características, a su capacidad para formar complejos de inclusión^{1,2}. La amilosa es utilizada para la retención de diferentes tipos de sustancias, como por ejemplo los compuestos organolépticos. Estos compuestos presentan múltiples aplicaciones entre las que podemos citar la actividad escabicida y pediculicida del benzoato de bencilo, el poder saborizante y la actividad antioxidante de la vainillina, así como las propiedades analgésicas y antioxidantes del eugenol^{3,5}.

El análisis de semejanza^{6,8} se ha convertido en una importante herramienta en áreas como el diseño molecular y la química aplicada a la medicina donde una premisa central validada por la experiencia es que moléculas que son estructuralmente similares tienen actividades biológicas similares⁷. Este análisis comprende la especificación de una estructura determinada caracterizada por un conjunto de uno o más descriptores que son a su vez comparados con el correspondiente conjunto de descriptores de las otras estructuras a comparar. Los coeficientes de semejanza proporcionan entonces una medida cuantitativa del grado de relación estructural entre cada par de representaciones⁹. Algunos coeficientes son medidas de distancias o de falta de semejanza entre dos objetos mientras otros miden la semejanza

directamente. En la mayoría de los casos un coeficiente de semejanza puede tomar valores entre 0 y 1 o puede ser normalizado en dicho rango⁹.

La idea de determinar una medida numérica de semejanza entre dos objetos, cada uno caracterizado por un conjunto común de atributos, es común en varias disciplinas. Por esta razón algunos coeficientes de semejanza tienen características en común como es el caso del coeficiente de asociación de Tanimoto (de Jaccard) cuyo complemento es el coeficiente de distancia de Soergel y es monótono con el coeficiente de Dice⁹. Para variables dicotómicas, el coeficiente $S_{A,B}$ de Tanimoto para medir la semejanza entre un sistema A y otro B se calcula mediante la expresión:^{9,10}

$$S_{A,B} = \frac{c}{a+b-c} \quad (1)$$

y toma valores entre 0 y 1. En esta expresión a y b son propiedades comparables correspondientes a cada uno de los objetos A y B, respectivamente, mientras que c es una variable que se obtiene de asociar las propiedades a y b en las mismas condiciones que ellas individualmente. A mayor semejanza entre los sistemas, entonces c será más similar al valor de a o de b, éstas tenderán a ser idénticas entre si, y la expresión tiende al valor unitario.

En el presente trabajo se realiza un análisis de semejanza, con vistas a escoger el mejor valor límite del coeficiente de Tanimoto para el estudio de los valores termodinámico-estadísticos de las interacciones moleculares en sistemas formados por la amilosa y los compuestos organolépticos eugenol demetilado, linalol, vainillina y benzoato de bencilo.

METODOLOGÍA DE TRABAJO

Con vistas a hacer menos complejo el sistema objeto de estudio, se seleccionó la dextrina formada por tres unidades de α 1,4-glucosa (Figura 1), con el objetivo de reproducir el comportamiento de la amilosa, que como ya habíamos mencionado, es un polisacárido lineal de alto peso molecular formado por varias unidades de α 1,4 -glucosa.

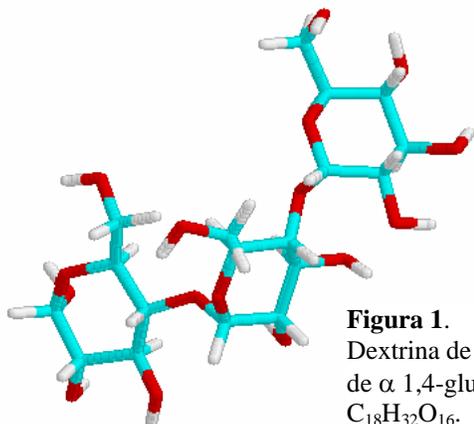


Figura 1.
Dextrina de tres unidades
de α 1,4-glucosa
 $C_{18}H_{32}O_{16}$.

Para nuestro trabajo utilizamos la aproximación **MMH** (Hipersuperficies de Múltiples Mínimos) cuyos fundamentos aparecen descritos en otros artículos ya publicados^{11,12} **MMH** combina procedimientos químico-cuánticos para el cálculo de las energías de los mínimos locales con la estadística para la determinación de las funciones termodinámicas de asociación.

En términos estadísticos¹² 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:

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

$$S_{\text{ass}} = R \ln q^* + \frac{\Delta E_{\text{ass}}}{T} \quad (3)$$

$$\Delta F_{\text{ass}} = F - \varepsilon^{\text{ref}} = -RT \ln q^* \quad (4)$$

donde T es la temperatura en Kelvin, 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:

$$q^* = \sum_i g_i e^{\frac{-\Delta \varepsilon_i}{RT}} \quad (5)$$

Se toma como estado de referencia convencional una celda con el mismo número de moléculas aunque no interactuantes y en el mismo estado rotovibracional y traslacional que las moléculas asociadas. Por tanto, la energía de la celda respecto a la escala de referencia es:

$$\Delta \varepsilon_i = \varepsilon_i - \varepsilon^{\text{ref}} = \varepsilon_i - (\varepsilon_{\text{dextrina}} + \varepsilon_{\text{organoléptico}}) \quad (6)$$

siendo $\Delta \varepsilon_i$ el término que aparece en la ecuación (3).

De este modo, en cada caso se construyen agregados moleculares, o celdas posibles del espacio de configuraciones en ese conjunto estadístico, formados por la molécula de dextrina y el compuesto organoléptico eugenol demetilado, vainillina, linalol o benzoato de bencilo (Figura 2). Para el cálculo de geometrías y energías de estos sistemas se utiliza el programa MOPAC con el hamiltoniano semiempírico PM3.^{13,14}

El estudio de estos agregados moleculares implica un gran esfuerzo computacional, partiendo de la generación de un mínimo de alrededor de 25 celdas para cada sistema molecular dextrina-compuesto organoléptico donde estos aparecen en posiciones seleccionadas aleatoriamente y, obviamente, no optimizadas¹⁵. Luego se lleva a cabo la optimización de la geometría (búsqueda en el "camino" de los

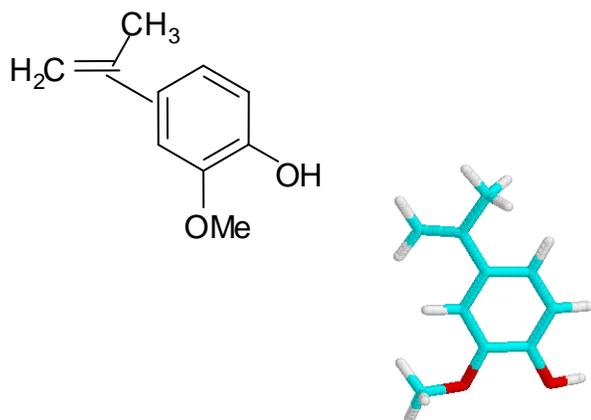
gradientes de cada mínimo en la correspondiente superficie de energía potencial con respecto a las coordenadas nucleares del sistema) y la consiguiente definición de las energías de cada arreglo molecular, hasta encontrar el conjunto de mínimos locales con el cual sea posible la descripción estadística del sistema. Una vez encontrado dicho conjunto se lleva a cabo el procesamiento estadístico¹⁵ de estos resultados para encontrar las funciones termodinámicas de asociación para dicho sistema. Luego, se demuestra la convergencia de las energías de asociación y es posible buscar aquellas celdas más estables en cada caso para así describir las interacciones en estos sistemas moleculares. Es en este proceso donde puede ocurrir una redundancia de estructuras degeneradas que no tienen significación en la descripción del sistema. Si desde más de una estructura aleatoria inicial, el camino de los gradientes llega a un mismo mínimo (o aproximadamente el mismo) las estructuras repetidas representan degeneraciones que no tienen nada que ver con la descripción del sistema, sino con la simple casualidad de que la estructura de partida condujera a situaciones intermoleculares similares.

ANÁLISIS DE SEMEJANZA

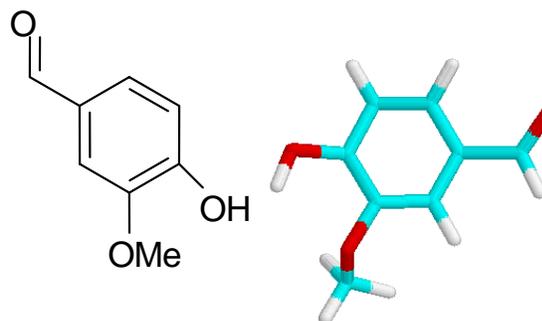
Se llevó a cabo el análisis de semejanza con vistas a escoger el mejor coeficiente de Tanimoto para este tipo de sistemas. Es necesario ante todo tener en cuenta que en estas superficies de energía potencial con respecto a las coordenadas nucleares, o hipersuperficies, la degeneración puede ser de dos tipos:

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 generalmente redundante ya que no aporta información nueva a la función de partición. Debe destacarse que en el caso de sistemas con un cierto nivel de simetría pueden existir degeneraciones de este tipo que NO son redundantes si los átomos son distinguibles, como es el caso. Estas redundancias SI son significativas y no deben ser descartadas.

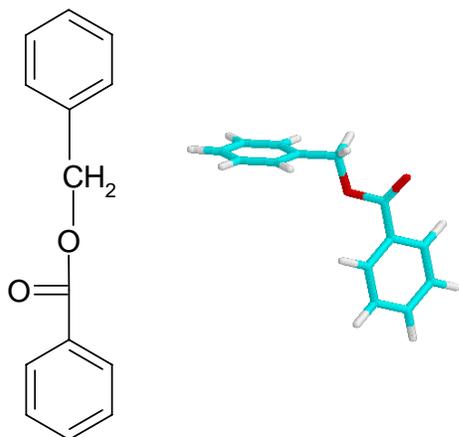
A) Eugenol dem. $C_{10}H_{12}O_2$.



B) Vainillina $C_8H_8O_3$.



D) Benzoato de bencilo $C_{14}H_{12}O_2$.



E) Linalol $C_{10}H_{18}O$.

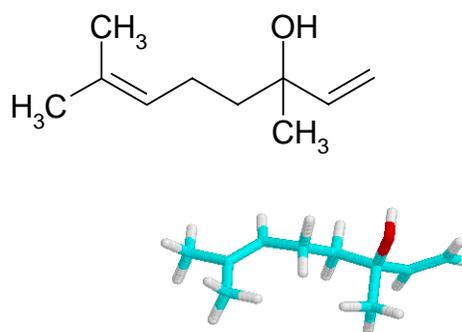


Figura 2. Compuestos organolépticos estudiados.

Aquellas que tienen diferentes ordenamientos moleculares pero la misma energía, lo que sí representa una degeneración significativa. Entonces, si las celdas son realmente diferentes deben ser consideradas en la función de partición, aunque tengan valores de energías muy similares. Este es el caso de conformaciones similares en sistemas simétricos cuando los átomos son distinguibles.

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 el programa Q2¹⁵ de procesamiento estadístico contiene una subrutina llamada Tanimoto especialmente diseñada con este propósito. Esta subrutina analiza la semejanza entre arreglos moleculares para desechar la degeneración del tipo i). El procedimiento de Tanimoto calcula la semejanza entre las estructuras par a par mediante la comparación de todos los clusters con una diferencia de energía menor de 0.096 kJ/mol con respecto a una anterior (este valor se toma teniendo en cuenta la confiabilidad estimada para un hamiltoniano semiempírico).

Luego se convierten las coordenadas de cada átomo de internas a cartesianas. De este modo, se construye la matriz [D] de los módulos de los vectores de posición con respecto al origen de coordenadas fijado en el átomo 1.

$$[D] \equiv [r_1, r_2, r_3, \dots, r_N] \quad (7)$$

donde N es el número total de átomos..

El índice de Tanimoto correspondiente a la comparación de las celdas A y B se determina mediante la expresión:

$$T = \frac{M}{(A + B - M)} \quad (8)$$

donde A, B, M se calculan mediante las siguientes expresiones:

$$M = \sum_{i=1}^N r_i^A r_i^B \quad (9)$$

$$A = \sum_{i=1}^N r_i^A r_i^B \quad (10)$$

$$B = \sum_{i=1}^N r_i^B r_i^B \quad (11)$$

r_i^A es un elemento de $[D_A]$ y r_i^B de $[D_B]$ correspondientes a las estructuras A y B, respectivamente.

Entonces, fijamos un valor límite de discriminación para considerar las celdas iguales o no desde el punto de vista geométrico. Por ejemplo si el valor calculado de T (índice de Tanimoto) es mayor que 0.85 (valor límite fijado empíricamente) se puede considerar que esos arreglos moleculares son equivalentes y estamos en presencia de clusters geoméricamente degenerados. Así, si T es menor de 0.85 los clusters son diferentes y estamos en presencia de degeneración del tipo ii), que sí contribuye a la función de partición.

RESULTADOS

En este caso probamos con un valor inicial de $T = 0.85$, siguiendo experiencias previas con otros sistemas estudiados¹⁶, sin embargo se demostró que debido a la posibilidad de la dextrina de adoptar diferentes ordenamientos espaciales, con este valor de T se eliminaban como iguales ordenamientos moleculares que en realidad eran diferentes. Por ello se llevó a cabo el siguiente análisis:

Primeramente comparamos los valores calculados de E_{ass}, F_{ass} y S_{ass} con $T = 0.85$ y con $T = 0.95$. Como se observa en las Figuras 9, 10 y 11 (Tablas I-III), los resultados obtenidos en cada caso no difieren prácticamente; por lo cual, desde el punto de vista del resultado final, podríamos utilizar, en principio, cualquiera de estos valores límites de discriminación. Llama la atención que al refinar el índice de Tanimoto a valores superiores, la entropía de asociación aumenta como producto de la consideración de más estados degenerados, lo que es una consecuencia esperada y confirmatoria de las consideraciones estadísticas en las que se fundamenta el análisis. En la Tabla IV vemos la cantidad de celdas degeneradas para cada sistema a $T = 0.85$ y $T = 0.95$ y es posible comprobar que no difieren mucho. La mayor diferencia se observa para el caso del linalol, sin embargo, como se puede observar claramente en las Figuras 9-11, no afecta significativamente los valores calculados.

Tabla I. Valores calculados de energía de asociación para cada sistema dextrina-compuesto organoléptico.

	E _{ass} (kJ/mol)	
	T = 0.85	T = 0.95
eugenol demetilado	-29.52	-29.51
vainillina	-30.17	-29.95
benzoato de bencilo	-31.66	-31.60
linalol	-31.44	-31.34

Sin embargo, se hace necesario hacer un análisis más profundo considerando si aquellas celdas eliminadas como iguales geométrica y energéticamente, en realidad lo son.

Tabla II. Valores calculados de energía libre asociación para cada sistema dextrina-compuesto organoléptico.

	F_{ass} (kJ/mol)	
	T = 0.85	T = 0.95
eugenol demetilado	-33.38	-33.38
vainillina	-32.82	-32.92
benzoato de bencilo	-35.09	-35.10
linalol	-35.12	-35.15

Tabla III. Valores calculados de entropía de asociación para cada sistema dextrina-compuesto organoléptico.

	S_{ass} J/mol K	
	T = 0.85	T = 0.95
eugenol demetilado	12.95	12.98
vainillina	8.88	9.95
benzoato de bencilo	11.52	11.74
linalol	12.36	12.80

Tabla IV. Cantidad de celdas degeneradas para cada sistema dextrina-compuesto organoléptico.

	# de celdas degeneradas	
	T = 0.85	T = 0.95
eugenol demetilado	2	1
vainillina	4	1
benzoato de bencilo	6	0
linalol	7	2

Por ejemplo, las celdas dextrina-eugenol 9 y 18 son eliminadas como degeneradas tanto energética como geométrica, al utilizar el valor límite del coeficiente de Tanimoto 0.85. Sin embargo, al comparar las Figuras 3 y 4 vemos a simple vista como estas celdas realmente son diferentes desde el punto de vista geométrico, por lo cual es necesario trabajar con un coeficiente de semejanza mayor. De este modo escogemos un valor límite de $T = 0.95$. Se selecciona debido a que, lógicamente, debe ser mayor que 0.85 y en realidad la mayor parte de las celdas eliminadas en cada caso tenían valor de T' que bien podía ser mayor que 0.95 o mantenerse muy próximo a 0.85. En las Figuras 5 y 6 se muestran las dos celdas que resultan degeneradas con este nuevo valor del coeficiente de Tanimoto. Así confirmamos, apoyados por algunas de las distancias entre átomos más importantes, que las celdas dextrina-eugenol 9 y 20 son realmente degeneradas.

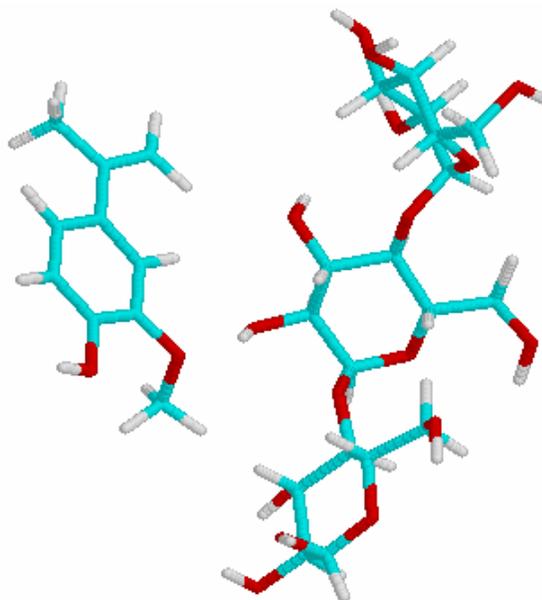


Figura 3. Celda 9 dextrina-eugenol.

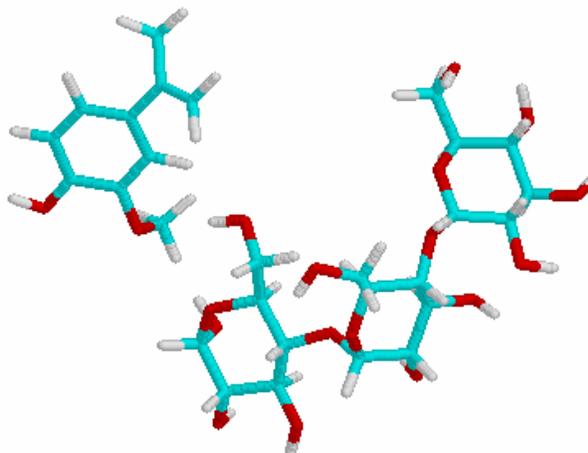


Figura 4. Celda 18 dextrina-eugenol.

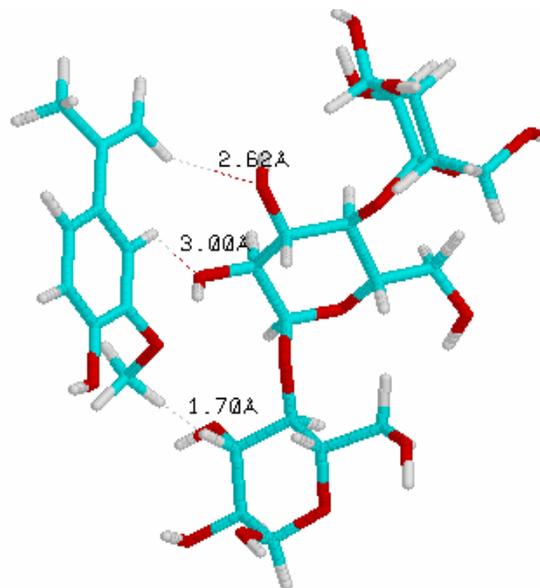


Figura 5. Celda 9 dextrina-eugenol.

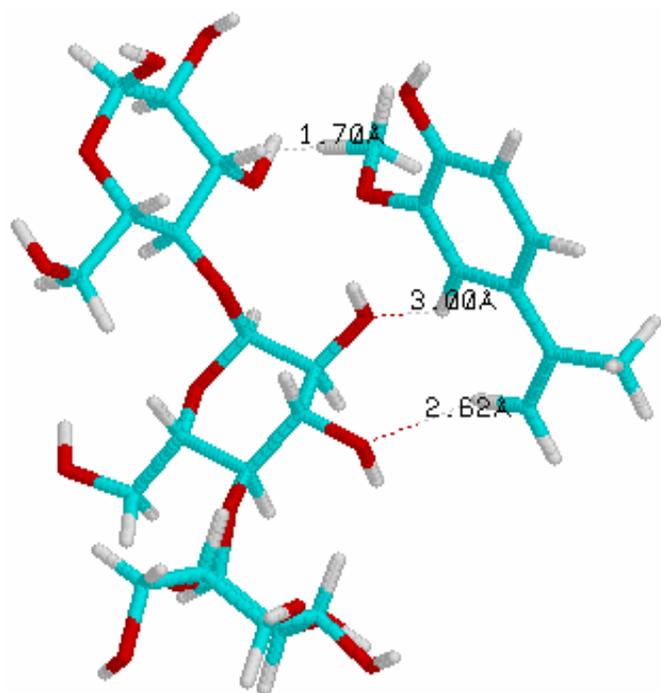


Figura 6. Celda 20 dextrina-eugenol.

Otro ejemplo se muestra en las Figuras 7 y 8 donde aparecen dos celdas dextrina-vainillina que se consideran degeneradas utilizando un valor límite de $T = 0.95$. Hemos señalado en dichas figuras algunas de las distancias más significativas con el objetivo de corroborar la similitud entre dichas celdas. De esta forma es posible comprobar que son también degeneradas geométricamente.

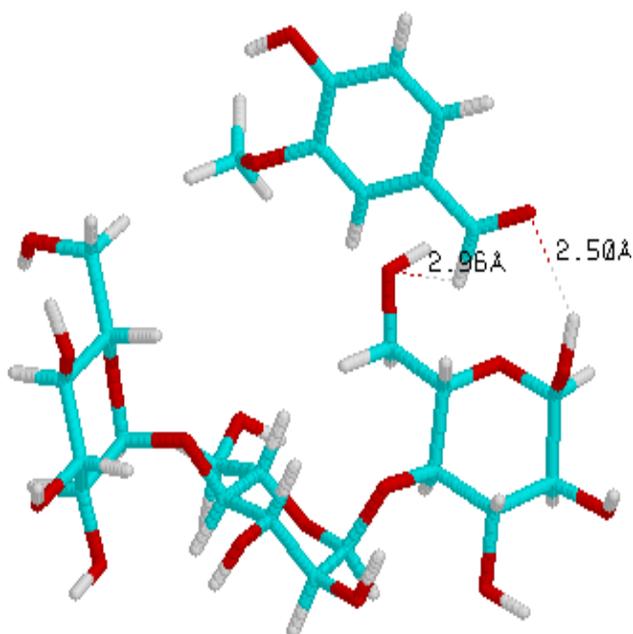


Figura 7. Celda 1 dextrina-vainillina.

CONCLUSIONES

Al realizar el análisis de semejanza en los sistemas moleculares dextrina-compuesto organoléptico, fue posible demostrar que en este caso el valor límite de discriminación de Tanimoto idóneo fue de 0.95. Se observó que, aunque los valores de las funciones termodinámicas de asociación, no diferían si se trabajaba tanto con $T = 0.85$ como con $T = 0.95$, con el primer valor de T se consideraban como iguales celdas diferentes en realidad. Esto es de esperar debido a que, desde el punto de vista estructural, es necesario considerar las múltiples posibilidades de ordenamientos espaciales diferentes, presentes en la dextrina estudiada, debido a su relativa mayor complejidad estructural con respecto a otros sistemas moleculares más sencillos.

No obstante lo anteriormente expuesto es preciso señalar que este trabajo demuestra que en este análisis debe partirse de consideraciones racionales en el momento de establecer números límite y cualquier tipo de criterio de convergencia. Por ejemplo, carece de sentido llevar la convergencia de la suma estadística de las energías en las simulaciones a límites inferiores a la propia expectativa de predicción energética del hamiltoniano seleccionado para la hipersuperficie. Igualmente, una semejanza mayor que este límite es seguramente una semejanza a los efectos del presente método. Todo ello también debe condicionarse al tamaño (número de átomos y moléculas) del sistema y a la simetría del mismo. El índice propuesto de 0.95 es un valor de referencia con buenas expectativas de éxito.

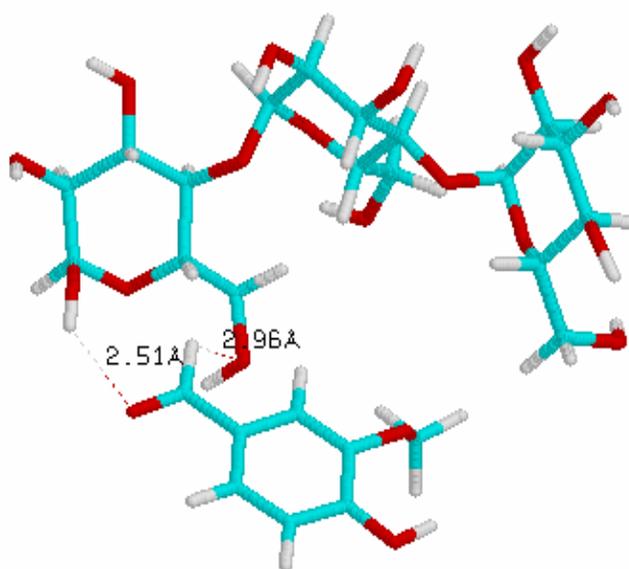


Figura 8. Celda 5 dextrina- vainillina.

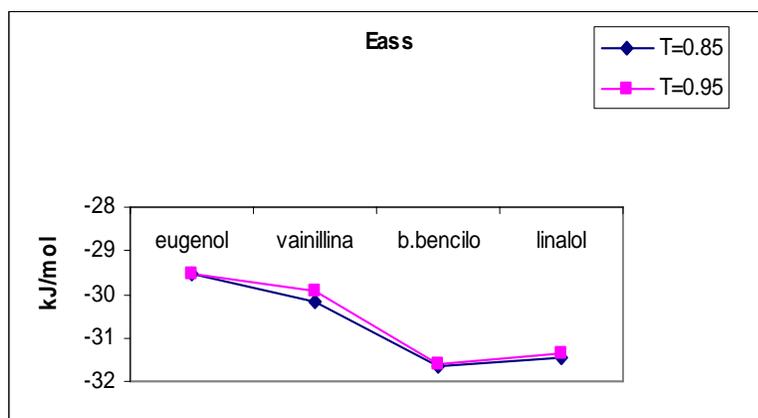


Figura 9. Valores calculados de energía de asociación para cada sistema dextrina-compuesto organoléptico.

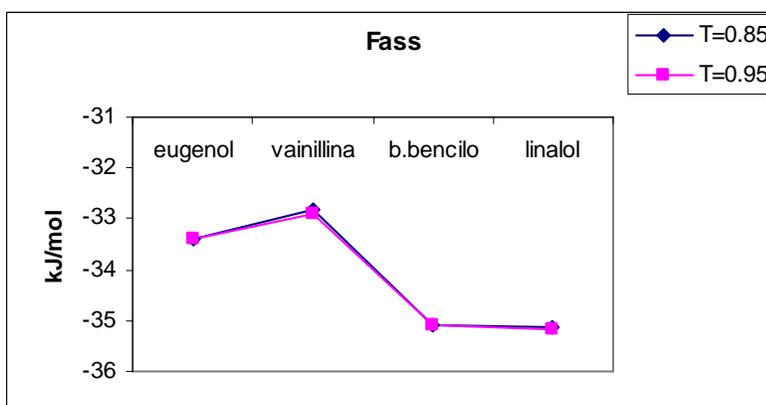


Figura 10. Valores calculados de energía libre de asociación para cada sistema dextrina-compuesto organoléptico.

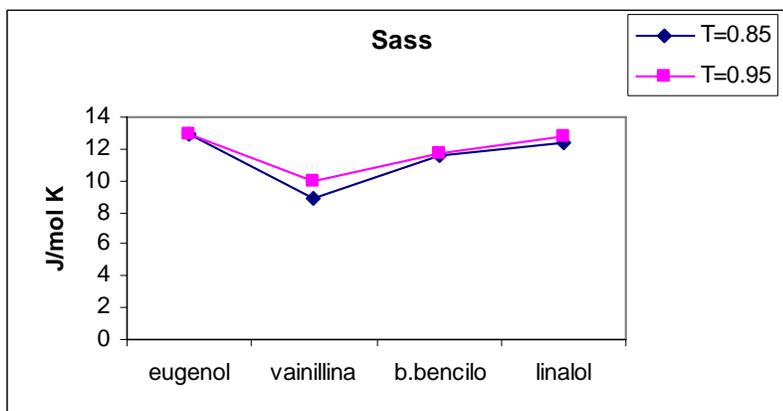


Figura 11. Valores calculados de entropía de asociación para cada sistema dextrina-compuesto organoléptico.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer a los revisores de la Revista Cubana de Física por sus acertados comentarios. Este trabajo se ha realizado bajo

los auspicios de la Universidad de La Habana y del Servicio Alemán de Intercambio Académico (DAAD). La asesoría del Dr. Roberto Cruz ha sido decisiva para la utilización de técnicas de semejanza.

REFERENCIAS

- (1) WULFF A., G.S. and O. HOELLER (1998): **Carbohydr. Res.** 307, 19-32.
- (2) SHIMADA H., J.K.; T. TAKADA; S. KITAMURA and K.J. KAJIWARA (2000): **Phys. Chem. B** 104, 2136 - 2147.
- (3) KIKUZAKI S., H.H.; Y. KAWAI and N. NAKATANI (1999): **Phytochemistry**, 52, 1307-1312.
- (4) OGATA M., M.H.; K. SHIMOTOHNO; S. URANO and T.J. ENDO (1997): **Am. Oil Chem Soc.**, 74, 557-562.
- (5) AHMED S., M.A. **et al.** (2000): **Pharmazie**, 55, 314 - 316.
- (6) VARMUZA, K.; M. KARLOVITS and W. DEMUTH (2003): **Analytica Chimica Acta**, 490, 313-324.
- (7) MARTIN, Y.C.; J.L. KOFRON and L.M. TRAPHAGEN (2002): **Journal of Medicinal Chemistry** 45, 4350-4358.
- (8) HOLLIDAY, J. D.; N. SALIM and P. WILLET (2005): **ACS Symposium Series**, 894, 77-95.
- (9) WILLET, P.J. (1998): **Chem. Inf. Comput. Sci.**, 38, 983-996.
- (10) FISANICK, W.L. and A.H.; RUSINKO III (1994): **J. Chem. Inf. Comput Sci.**, 34, 130-134.
- (11) MONTERO E., L.A. **et al.** (1998): **A J. Am. Chem. Soc.**, 120, 12023-12033.
- (12) MONTERO M., L. A. and J. FABIAN (2000): **Int. J. Quant. Chem.**, 79, 8-16.
- (13) STEWART P., J.J. (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 and Linux systems.
- (14) STEWART P., J.J. (1989): **Journal of Computational Chemistry**, 10, 209-264.
- (15) MONTERO, L. A., GRANADA and Q Programs for PC computers Available on request 1996-2000.
- (16) SÁNCHEZ, E. M., L.A.; J.M. HERMIDA; R. CRUZ y G. GONZÁLEZ (2000): **Revista Cubana de Física**, 17, 41-45.

PRIMEROS PASOS DE LAS INVESTIGACIONES EN FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO EN CUBA

Diego de Jesús Alamino Ortega*, Universidad Pedagógica de Matanzas, Cuba, E-mail:

*alamino@filial.serv.edu, spujg@ispmtz.rimed.cu

RESUMEN

Las investigaciones en el campo de la Física en Cuba son relativamente recientes comparadas con la antigüedad de esta ciencia y la práctica mundial; sus inicios se encuentran en la década de los sesenta del recién concluido siglo. La pionera en estas investigaciones ha sido la Escuela de Física de la Universidad de La Habana, fundada en diciembre de 1961, con tantas expectativas como carencias en el orden material y del potencial humano, inclinándose rápidamente hacia las investigaciones en la Física del Estado Sólido, en especial lo referente a semiconductores y metales. Esta dirección de trabajo se proyectaba hacia las necesidades nacionales, unido a la factibilidad de desarrollar este tipo de investigaciones en las condiciones de un país con bajos recursos. A través de entrevistas con protagonistas de aquellos tiempos y fuentes documentales se trata en este trabajo de exponer cómo fueron desarrollados los primeros pasos en las investigaciones en Física del Estado Sólido en Cuba, que pueden verse desde varias vertientes: la formación del personal, la creación de la base material y las investigaciones propiamente dichas. Se enmarca esta etapa inicial hasta 1975, que es cuando se celebra en Cuba el IV Simposio Latinoamericano de Física del Estado Sólido, lo que significó el reconocimiento de la comunidad científica internacional a la actividad de los investigadores cubanos en la esfera de la Física del Estado Sólido.

ABSTRACT

The investigations in the field of the Physics in Cuba are relatively new compared with this antiquity science and the world practice; their beginnings are in the sixties of the recently concluded century. The pioneer in these investigations has been the Physics School of Havana's University, founded in December 1961, with so many expectations like lacks in material resources and manpower, leaning quickly toward the investigations in Solid State Physics, especially in semiconductors and metals. This work direction was projected toward the national necessities, together to the feasibility to develop this type of investigations in a country with few resources. Through interviews with protagonists and original documents this work expose how the first steps were developed in the investigations in Solid State Physics in Cuba, this efforts can be analyzed from several point of views: the personal formation, the creation of the material base and properly the investigations. The author frame the first steps development period up to 1975, when in Cuba, the IV Latin American Symposium of Solid State Physics has taken place, which means the international recognition of the international scientific community to the work of the Cuban investigators in the sphere of Solid State Physics.

INTRODUCCIÓN

Desde el siglo XVIII hay referencias⁽¹⁾ de que en Cuba se enseñaban contenidos de física en determinadas instituciones de carácter religioso (católicas), incluida la Real y Pontificia Universidad de San Gerónimo de La Habana, fundada en 1728. El momento más prominente de esta etapa inicial de la enseñanza de la física en Cuba, se debe al presbítero Félix Varela Morales⁽²⁾ (1787-1853), quien entre 1811 y 1820, enseñó Filosofía en el Real y Conciliar Colegio Seminario de San Carlos y San Ambrosio en La Habana. José A. Saco y José de La Luz Caballero, antiguos alumnos del presbítero habanero, se convirtieron en sus seguidores, pero por diversas razones interrumpieron su magisterio en la física, y el estudio de esta ciencia en Cuba no continuó avanzando, en lo que resta del siglo XIX, con el impulso que le imprimió Varela y las exigencias que el desarrollo científico a

escala mundial requería. Después, como es de esperarse, continuó enseñándose la física en Cuba, extendiéndose esta enseñanza al nivel preuniversitario, pero con un penoso estado de atraso. Un momento importante de renovación se produjo cuando Manuel F. Gran Gilledo⁽³⁾ (1893-1962) ingresa como Profesor a la Universidad de La Habana (1923) creando los laboratorios docentes de física y dándole a la enseñanza de esta asignatura aires de modernidad. Otros profesores de la Universidad de La Habana, con iniciativas muy personales, por los años cincuenta del siglo XX, también contribuyeron al mejoramiento de la enseñanza de la física, entre ellos Marcelo Alonso⁽⁴⁾, probablemente el físico cubano más universalmente conocido, ya que los textos de física de su autoría se emplean en diversos países.

Antes del triunfo de la Revolución en 1959, no se graduaban en Cuba físicos propiamente dichos, sino habían dos carreras Ciencias Físico-Matemáticas y Ciencias Físico-Químicas⁽⁵⁾, las cuales graduaban dos o tres alumnos por año y daban cierta preparación en esta disciplina, pero incompleta, si comparamos con lo que debe ser la formación de un físico. Por otro lado puede asegurarse que para ese entonces, no existían actividades de investigación en el campo de la física en Cuba, inclusive el triunfo revolucionario encuentra a la Universidad de La Habana clausurada desde 1956, por los enfrentamientos que se producían entre los estudiantes y las fuerzas represivas de la tiranía de Batista.

Formación de los investigadores

Un momento importante para la física en Cuba lo constituyó la fundación de la Escuela de Física de la Universidad de La Habana en diciembre de 1961⁽⁶⁾, con carencias en todos los órdenes, en particular de equipamiento de laboratorio y de profesores, en el caso de estos últimos por el éxodo de profesionales que se produce en el país a partir de enero de 1959. Para la solución de este grave problema se acudió a varias alternativas, entre las cuales estuvo el empleo de los alumnos de años superiores para impartir la docencia a los de años inferiores, fundamentalmente como ayudantes de laboratorio, lo que significó para estos estudiantes una posibilidad de superación y en algunos casos le dio la oportunidad de iniciarse como investigadores, al incorporarse informalmente al claustro de profesores de la naciente Escuela de Física. Como otra de las soluciones emergentes tomadas, fueron enviados en 1961 los primeros becarios a formarse en la desaparecida URSS, los que para el año 1966 regresarían ya graduados⁽⁶⁾ y con preparación en la esfera de las investigaciones en diversas temáticas, lograda durante su formación universitaria. También al inicio de los sesenta se recibió la ayuda de profesores extranjeros procedentes de la URSS y otros países: Francia, Argentina, EEUU, Italia, etc. que impartieron docencia en la Escuela de Física y se encargaron de iniciar las primeras investigaciones.

Un elemento importante para solucionar la desactualización en el campo de la física existente en Cuba en los sesenta, lo significó la impresión en el país de prestigiosos textos, fundamentalmente de procedencia occidental, entre ellos: "Física: para estudiantes de ciencias e ingeniería", de Robert Resnick y David Halliday (1966), el "Curso de Física" de la Universidad de Berkeley (el libro de Mecánica apareció en 1969), la "Física del Estado Sólido" de Charles Kittel (1971), "Mecánica Clásica", de H. Goldstein (1968), "Electrodinámica Clásica" de J.D. Jackson (1969) y otros de procedencia soviética

como los de "Mecánica Cuántica" de Blokhintsev (1971) y A. S. Davidov (1969), publicados en idioma inglés. Ya desde antes la Editora Universitaria sacaba a la luz una llamada Colección Escuela de Física de la cual se puede citar al libro "Electrodinámica Macroscópica" (1966) de A.A. Vlasov, Profesor de la Universidad de Moscú; la Cooperativa del Libro de la Federación de Estudiantes de la Universidad de Moscú. La Cooperativa del Libro de la Federación de Estudiantes Universitarios (FEU), también participaba en este esfuerzo y uno de los títulos que imprimía era "Mecánica" de Keith R. Symon (1963).

En los años sesenta, trabajaban en la Escuela de Física, conjuntamente con los profesores cubanos dos experimentados y entusiastas profesores extranjeros, una argentina y un norteamericano que eran solidistas. Teniendo en cuenta estos precedentes y fundamentalmente argumentos de índole económicos, que favorecían a las investigaciones en la Física del Estado Sólido, por su bajo costo en inversiones para el trabajo científico y gran aplicación práctica, se tomó como política científica la determinación, a finales de la década de los sesenta, de dedicarse en la Escuela de Física de la Universidad de La Habana únicamente a las investigaciones relacionadas con la Física del Estado Sólido. Se organizaron entonces las "Escuelas de Verano"⁽⁷⁾, impartidas por físicos franceses y en las que se expusieron cursos de física de los materiales y de dispositivos semiconductores.

La colaboración con instituciones extranjeras también contribuyó a la formación de los investigadores cubanos y allanó el camino para la necesaria obtención de la información científica, de este modo físicos, fundamentalmente de La Universidad de La Habana, mediante acuerdos de colaboración, fueron a entrenarse a Francia (Escuela de Minas de Nancy)⁽⁸⁾, la Universidad de Parma en Italia, la Universidad de Moscú y el Instituto Ioffe de Leningrado (hoy San Petersburgo). También Checoslovaquia y Polonia⁽⁸⁾ participaron en la preparación de físicos cubanos.

Inicios de las investigaciones en Física del Estado Sólido

Como implícitamente se ha reconocido en párrafos anteriores, la Escuela de Física de la Universidad de La Habana, resulta ser la iniciadora de las investigaciones en Física del Estado Sólido en Cuba. Se menciona a la argentina Dina Weissmann y al norteamericano Theodore Veltford, como los primeros en iniciar investigaciones de FES en Cuba, en el primer lustro de los sesenta⁽⁹⁾. En particular Veltford, creó el primer laboratorio de Física del Estado Sólido, como organización y físicamente, además de motivar a la dirección universitaria por las investigaciones en FES, lo que permitiría en el futuro la extensión de los

trabajos. También a través de estos investigadores se adquirió un horno de calentamiento inductivo por radiofrecuencias y potencia de 10kV, de marca Radyne, que aún se puede ver en la Facultad de Física, aunque inactivo. Este horno permitía el crecimiento de materiales semiconductores por el método de Czochralski, y el empleo de la Fusión Zonal. De este forma se va perfilando el propósito de construir dispositivos semiconductores a partir de monocristales crecidos en el país. Todos los investigadores trabajan primero unidos, en el Grupo de Semiconductores y después de tres años de trabajo se produce la división en dos grupos: los que se dedicarán a la física de los dispositivos semi-conductores y los que optan por la física de los cristales semiconductores.

Muchos de los materiales necesarios para las investigaciones y algunos aparatos, llegan al país por la vía de los propios profesores extranjeros y los cubanos que salen al exterior con el propósito de entrenarse. Por otro lado se fomentaba la construcción, en la propia Escuela de Física, de equipos e instrumentos con miras a la investigación científica, para lo que se contaba con un Taller de Mecánica, habilitado con tornos, fresadoras y otras máquinas herramientas, un Taller de Vidriería y otro de Electrónica. Esto fomenta lo que se llamó el grupo de desarrollo, que en conjunción con los demás profesores de la Escuela de Física en estos primeros tiempos lograron construir entre otros equipos:

- Hornos y sus controles de temperatura⁽¹⁰⁾
- Espectrómetro Mössbauer a velocidad constante⁽¹¹⁾
- Magnetómetro vibracional de alta sensibilidad⁽¹²⁾
- Microbalanza de cuarzo⁽¹³⁾
- Bomba difusora⁽¹⁴⁾
- Sistema de pulverización catódica⁽¹⁵⁾

La iniciativa de los investigadores fue tal que se crearon laboratorios completos. En el campo de los dispositivos se hizo primero una pequeña línea de fabricación de diodos y transistores por aleación, con todos los elementos hechos en la Escuela de Física y después se instaló una línea completa de fabricación de dispositivos de silicio con tecnología planar, también con casi todos los componentes construidos en el país.

El horno de calentamiento inductivo, del que ya se ha hablado, abre las posibilidades del trabajo en metales, temática donde ya hay algún personal que se ha preparado en el extranjero. La atención de este grupo de investigadores se dirige a trabajar el sistema Al 4% Cu (precipitación), que es un sistema cómodo de estudiar, por lo que serviría de modelo que ayudará al entrenamiento de los investigadores de

este grupo, en técnicas tales como: microscopia electrónica, difracción de electrones y rayos X, tratamientos térmicos y nuclear. La Dra. María Ivanofna Sajarova⁽¹⁶⁾, de la Cátedra de Física del Estado Sólido de la Universidad Estatal de Moscú fue inspiradora de este trabajo y facilitó las muestras con que se inició el mismo. Por otro lado la aleación que se trabajaba resultaba de cierta importancia perspectiva, por su relación con la producción del duraluminio.

Los investigadores en la **física de los metales** contaban con rudimentarios equipos, tales como: un microscopio electrónico de 50 kV, "heredado" de la Escuela de Medicina, de marca ME-2 Karl Zeiss Jena con lentes electrostáticas, un equipo de Rayos X, Philips Norelco, construido aproximadamente en 1948, con cámara Debye Scherrer y otra Wissemberg⁽⁸⁾, pero poseían el apoyo de otras instituciones como el Centro Nacional de Investigaciones Científicas (fundado en 1965) donde se encontraba un microscopio electrónico más moderno y potente (Hittachi HU-11 a 100 kV) y también un equipo de rayos X (TUR M-17, radiación filtrada de Co K α). En la Escuela de Ingeniería Mecánica de La Universidad de La Habana, podían también efectuar otras pruebas, entre ellas microdureza. Paralelo al trabajo con el Al-4% Cu se trabajaba en la purificación zonal de aluminio donde partiendo de muestras de 99,7 de pureza se llegó a 99,996, haciéndose el análisis espectrográfico en la Escuela de Ingeniería Mecánica.

Los crecedores de cristales tuvieron como pionero al Lic. Fernando Crespo Sigler⁽⁹⁾. La dirección en esta línea se orientó de inicio, hacia la obtención de monocristales de germanio y posteriormente de silicio. Se caracterizaron los cristales obtenidos, para poder encontrar cuáles eran las variables de crecimiento adecuadas con miras a obtener un resultado, por ejemplo: una cantidad determinada de impurezas en el cristal, con cierto nivel de densidad de dislocaciones y otros parámetros. Las técnicas empleadas para estos propósitos, por la carencia de equipamiento, comenzaron por un estadio muy simple, la orientación se realizó mediante reflectogramas y la determinación de la densidad de dislocaciones por ataque químico⁽¹⁸⁾. Al igual que los investigadores del grupo de metal, los crecedores de cristales, trabajaron en la purificación de sus materiales por el método de la fusión zonal; en el caso del germanio partiendo de lingotes con resistividad entre 10 y 40 Ω cm, llegaron a obtener hasta 44 Ω cm en una purificación⁽¹⁹⁾. Después se pasó a la obtención de materiales con dopamiento controlado (germanio con antimonio) empleando el método del crisol flotante.

Existieron investigadores que se inclinaron hacia la caracterización de los materiales semiconductores, algunos de los cuales inicialmente, eran obtenidos en el extranjero, tal es el caso de los compuestos ternarios $ZnIn_2S_4$ ⁽²⁰⁾ y $Zn_2In_6S_{11}$ ⁽²¹⁾, que se trajeron a Cuba procedentes del laboratorio de materiales especiales de la Universidad de Parma. A estos compuestos se le investigó la cinética fotoconduccion y propiedades ópticas. Por las mediciones que se le efectuaron a estos materiales el equipamiento que se requería ya no era tan simple. Para determinar el índice de refracción fue empleado un espectrómetro UNICAMP SP- 800 ubicado en el CENIC y para las mediciones del espectro de absorción se usó un monocromador SF-4, al cual fue adaptado un fotomultiplicador DARIO 56AVP, como detector. Cristales ternarios de $ZnIn_2S_4$ fueron obtenidos en Cuba a finales del primer lustro de los setenta, por transporte químico, a partir de la fase vapor, con una tecnología construida en la propia Escuela de Física y materiales de pureza electrónica de procedencia extranjera, aunque paralelamente se trabajaba por obtener zinc de alta pureza por el método de la fusión zonal con calentamiento resistivo⁽²²⁾.

El trabajo en la Escuela de Física abarcó también lo relativo a capas delgadas, de esta forma se obtuvieron capas delgadas metálicas por evaporación térmica en alto vacío, y se estudió la oxidación de estas en el caso del aluminio. La obtención de capas epitaxiales desde la fase vapor en alto vacío también fue lograda en la mencionada institución, estas capas fueron de Ge/Ge (111), Ge-Si/Ge(111) y Si/(Ge-Si)/Ge (111)⁽²³⁾.

La construcción de dispositivos electrónicos, o lo que pudiéramos llamar la microelectrónica se desarrolló en forma paralela en la Escuela de Física y la Facultad de Ingeniería, donde después se funda en 1969 el Centro de Investigaciones en Microelectrónica (CIME), esta duplicidad tuvo sus aspectos positivos, al incentivar el trabajo a través de la competencia y el intercambio, pero en un país con bajos recursos, el fraccionamiento de los mismos limita las posibilidades de lograr éxitos en el trabajo y por tal razón la actividad de la microelectrónica quedó posteriormente radicada en el CIME, con la integración de un buen número de investigadores formados en la Escuela de Física.

El primer diodo cubano construido fue de germanio (por aleación) en el año 1968 y en su construcción participaron Fernando Crespo, Elena Vigil⁽⁹⁾ y Dina Weissman y en realidad su construcción tenía el propósito de desarrollar la tecnología en el país, incluso el germanio empleado fue traído del exterior. Las características voltampéricas del dispositivo obte-

nido daban cuenta de que efectivamente se trataba de un diodo. La comunicación de los resultados se realizó en el marco de un Congreso de Química celebrado en la Universidad de Oriente, fundamentalmente por dos razones: una, que se trataba de un proceso tecnológico y la otra, que los químicos por aquella época estaban más adelantados y organizados que los físicos, téngase en cuenta que es en febrero de 1974 cuando se realiza el Primer Encuentro de Físicos Cubanos y aún no se había fundado la Sociedad Cubana de Física. En particular diodos y transistores de germanio por aleación se obtenían ya en 1969. A esto siguió la obtención de transistores MOS canal p⁽²⁴⁾ y n, circuitos integrados MOS canal p, tetrodos MOS I²L, transistores bipolares npn normales y epitaxiales y transistores MOS con compuerta de polisilicio y celdas solares.

Los resultados de todos estos trabajos aparecieron mayoritariamente en publicaciones nacionales, pues no existía la experiencia ni el hábito de publicar, además que los resultados obtenidos no representaban, muchos de ellos, estrictamente una novedad científica, aunque iban marcando la reducción del gap tecnológico entre Cuba y otros países más adelantados en esta esfera. No obstante los solidistas cubanos a través de su participación en eventos e intercambios científicos con especialistas de varios países del mundo, se van dando a conocer y mereciendo el reconocimiento por el esfuerzo que venían realizando.

IV SIMPOSIO LATINOAMERICANO DE FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO /24/

Entre el 27 de enero y el 7 de febrero de 1975 se celebra en La Universidad de La Habana el IV Simposio Latinoamericano de Física del Estado Sólido (IV SLAFES), auspiciado por la UNESCO, el Centro Latinoamericano de Física (CLAF) y el PNUD. Cuba fue elegida como sede de este evento durante la celebración del III Simposio en México, lo que significó un reconocimiento a los avances experimentados por los físicos cubanos en el campo de la Física del Estado Sólido. Coincidiendo con el evento y con una duración de tres semanas, se efectuó un Curso de Dispositivos Semiconductores (3 al 21 de febrero).

Las temáticas convocadas para el IV SLAFES fueron: Transiciones de fase, Magnetismo y sus aplicaciones y Procesos de aglutinación. En cada una de estas temáticas se brindaron cinco Conferencias de 90 minutos de duración y en igual medida Seminarios. Los Conferencistas y las temáticas tratadas resultaron:

Transformaciones de fase

- “La descomposición espinodal (algunos aspectos teóricos y sus realidades)”
Prof. Alberto Bonfiglioli
Director de la División de Desarrollo de Aluminio Argentino (ALUAR), Argentina.
- “Modelo Ondulatorio de transiciones de fase”.
Prof. A. E. Cook
Universidad de Illinois, EE.UU.

Procesos de aglutinamiento

- “Compuestos III-V, sus propiedades, crecimiento y aplicación a los diodos emisores de luz”.
Prof. A.R. Peaker
Fervantti Hd. Gem Mill, del Reino Unido.
- “Método de Stepanov. Posibilidades y utilización en la obtención de materiales semiconductores”
Prof. I.I. Koptiev
Instituto Físico-Ioffe, de Leningrado, URSS.

Magnetismo y sus aplicaciones

- “Electrónica de metales de transición”
Prof. J.M. Ziman
Laboratorio de Física de la Universidad de Bristol, Inglaterra.
- “Magnetismo en los Metales”
Prof. P. Lederer
Facultad de Ciencias de la Universidad de París.
- “Ferromagnetismo, ferrimagnetismo y antiferromagnetismo en metales de Transición”
Prof. G.S. Krinchik
Universidad Estatal de Moscú.

Los trabajos presentados al IV SLAFES fueron en total 55 y de ellos, 26 correspondieron a físicos cubanos. Por los títulos de los trabajos se podrá tener una idea de las temáticas en que se trabajaba en 1975 y el grado de desarrollo alcanzado:

Transiciones de fase

- Cambio de la estructura policristalina de un acero estructural con el modo y grado de formación después de haber recibido distintos tratamientos térmicos.
- Puesta a punto de aceros al manganeso de alto límite elástico.
- Características de aceros inoxidables industriales. Influencia del tratamiento térmico sobre la fase precipitada.
- Estudio de la solubilidad de algunos aceros cubanos de construcción.
- Sobre el estudio actual de los métodos de análisis rogentnográficos.

- Cristalización e identificación por difracción de Rayos X de inclusiones de óxido extraídos de aceros al carbono.
- Estudio de la colocalización de O en aluminio 4% cobre.
- Análisis de Rayos X y macrodureza en una aleación de Al4% Cu.
- Estudio de dos aceros suecos de baja aleación y alta resistencia.
- Influencia del laminado sobre el revenido de aleaciones Hierro-Cromo-Manganeso-Silicio y Hierro-Manganeso-Titanio-Silicio.

Magnetismo

- Solución de la ecuación de masa efectiva para el excitón de Wannier en presencia de un campo eléctrico.
- Propiedades ópticas del AsGa.
- Teoría de espectros Mössbauer de aleaciones binarias mediante el modelo de la red tridimensional de Ising.
- RPE del ión Mn^{2+} en el compuesto ternario $ZnIn_2S_4$.

Procesos de Aglutinamiento

- Crecimiento de Cristales de $ZnIn_2S_4$.
- Crecimiento de Ge a partir del fundido.
- Fusión Zonal con Gradiente de temperatura.
- Crecimiento de capas epitaxiales de Ge a partir de la epitaxia líquida.
- Cristalización de Ge a partir de la fase gaseosa.

Dispositivos Semiconductores

- Interfaz Si-SiO₂.
- El tetrodo MOS.
- Movilidad en los canales de los T MOS.
- Efecto memoria en los compuestos ternarios.
- Tecnología para LSI.
- Construcción de equipos electrónicos.

Ya para el año 1975 se hacían investigaciones en FES en la Universidad de La Habana y en otros centros, pero lideraba esta temática la Escuela de Física, donde estaban organizados los investigadores en los siguientes grupos de trabajo⁽²⁶⁾:

- Física de los dispositivos semiconductores.
- Física de los cristales semiconductores.
- Física de los semiconductores.
- Física teórica del estado sólido.
- Magnetismo.
- Física de los metales.
- Grupo de desarrollo.

En forma implícita o explícita se ha hecho mención al trabajo de los diferentes grupos, pero quizás no halla quedado lo suficientemente subrayado lo relativo

al trabajo en la Física Teórica del Estado Sólido. Ya en lo antes expuesto se puede apreciar que durante el IVSLAFES aparecen trabajos de este corte, pudiéndose mencionar otros como el relativo al estudio de la dinámica de un electrón en un sistema de fonones⁽²⁷⁾.

En el IV SLAFES, de otras instancias ajenas a la UH, se presentaron cinco trabajos sobre transiciones de fase y uno sobre dispositivos semiconductores, los demás fueron presentados por los investigadores vinculados a los diferentes grupos de trabajo que funcionaban en la Escuela de Física. También desde el punto de vista organizativo dentro de los grupos existían proyectos, con sus correspondientes líderes o jefes de proyectos, al igual que un experimentado profesional fungía como jefe de cada uno de los grupos.

La asistencia de destacados Conferencistas al IV SLAFES y 82 solidistas de México, Argentina, Venezuela, Ecuador, Brasil, Colombia, Costa Rica, Perú y Chile, da una medida del reconocimiento al modesto desarrollo alcanzado por Cuba en un breve periodo de aproximadamente 15 años.

EPÍLOGO

REFERENCIAS

- (1) DANIUSHENKOV, V. y N. CORONA (1991): "Historia de la Física", La Habana, Pueblo y Educación.
- (2) ALAMINO, D. (1997): "El Magisterio de Félix Varela en la Física", **Palabra Nueva**, Arquidiócesis de La Habana, Año V, No. 55, febrero.
- (3) LE ROY, F. (1979): "Profesores de Física de La Universidad de La Habana desde su secularización en 1842 hasta Manuel F. Gran", Academia de Ciencias de Cuba, Centro de Estudios de Historia y Organización de la Ciencia "Carlos J. Finlay", La Habana, marzo.
- (4) PAGE, L. y M. ALONSO (1945): "Tratado de Física Teórica", Cultural S.A., La Habana.
- (5) Comité Local del IV Simposio Latinoamericano de Física del Estado Sólido, "La Física en Cuba", Impresora Universitaria "André Voisin", Diciembre de 1974.
- (6) BARACCA, A. (2000): "El despegue de la Física en Cuba desde el triunfo de la Revolución", **Libro de resúmenes del II Taller Iberoamericano de Enseñanza de la Física Universitaria**, La Habana, 24-28 de enero.
- (7) FUENTES, J. (2001): **Entrevista**, 23 de abril.
- (8) MARTÍNEZ, F. y J.R. QUIÑÓNEZ (2001): **Entrevista**, abril.
- (9) VIGIL, E. (2001): **Entrevista**, 3 de julio.

Los primeros pasos en la FES que se han relatado dan una idea del amplio esfuerzo realizado en el transcurso de unos pocos años por un colectivo, no solo de profesores, sino de magníficos técnicos, formados en la Escuela de Física de Universidad de La Habana, que contaron con el apoyo directo y constante del Rector Dr. José Miyar Barruecos. Un resultado importante de esta etapa es que la experiencia alcanzada permitió fundamentar la creación de una industria nacional de semiconductores de gran importancia relativa para el país y aportar para esa industria el personal especializado.

AGRADECIMIENTOS

A los fundadores de las investigaciones de Física del Estado Sólido en Cuba y en especial a aquellos cuyos nombres no han sido referenciados involuntariamente por el autor.

A todos los que han contribuido con la facilitación de información para la realización de este trabajo, así como a aquellos que a partir de ahora hagan llegar sus testimonios u opiniones para enriquecerlo o enmendar cualquier imprecisión histórica.

Al Dr. Saldaña por su invitación a presentar este trabajo durante el XXI Congreso Internacional de Historia de la Ciencia en México 2001.

- (10) CERDEIRA, A. y colaboradores (1972): "Construcción de hornos y de sus controles de temperatura para el desarrollo de la tecnología planar", **Ciencias**, Serie 2, **Física**, No. 4, marzo, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 3-19.
- (11) CIMINO, L. (1974): "Construcción de un espectrómetro Mössbauer a velocidad constante", **Ciencias**, Serie 2, **Física**, No.29, septiembre, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 23-32.
- (12) CAMPA DE LA, A. y M. del C. PIÑERA (1974): "Construcción de un Magnetómetro Vibracional de alta sensibilidad", **Ciencias**, Serie 2, No.29, septiembre, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 33-44.
- (13) DURAND, E. y colaboradores (1974): "Diseño y Construcción de una Microbalanza de Cuarzo", **Ciencias**, Serie 2, No. 29, septiembre, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 3-8.
- (14) DURAND, E. y N. LÓPEZ (1974): "Diseño y Construcción de una bomba de Difusión para sistema de alto vacío", **Ciencias**, Serie 2, No. 29, septiembre, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 11-19.
- (15) MARTELL, A. y E. PURÓN (1974): "Sistema de pulverización catódica para la obtención de capas delgadas semiconductoras", **Ciencias**, Serie 2, No. 29, septiembre, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 57-67.
- (16) COLECTIVO DEL GRUPO DE METALES (1972): "Estudio de la Precipitación en Al-4% Cu", **Ciencias**, Serie 2, **Física**, No. 11, septiembre, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 3-18.
- (17) ARMAS, F. de y F. MARTÍNEZ (1972): "Purificación y Análisis de Aluminio", **Ciencias**, Serie 2, **Física**, No. 12, octubre, Centro de Información Científica y Técnica, Universidad de La Habana, 3-4.
- (18) CRESPO, F. y colaboradores (1972): "Orientación y Medición de Dislocaciones en Monocristales Semiconductores" **Ciencias**, Serie 2 **Física**, No.1, enero, Centro de Información Científica y Técnica, Universidad de La Habana.
- (19) GONZÁLEZ, F. y L. FALCÓN (1973): "Crecimiento de Monocristales de Germanio con dopamiento controlado", **Ciencias**, Serie 2, **Física**, No. 15, enero, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 3-12.
- (20) HERNÁNDEZ, L. y colaboradores (1972): "Estudio de la cinética fotoconductiva en compuestos ternarios", **Ciencias**, Serie 2, **Física**, No. 7, mayo, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 3-12.
- (21) VASCO, J. E. y colaboradores (1972): "Propiedades ópticas de compuestos ternarios", **Ciencias**, Serie 2, **Física**, No. 8, junio, Centro de Información Científica y Técnica, Universidad de La Habana, 3-14.
- (22) TESTIMONIO DEL AUTOR.
- (23) GONZÁLEZ QUEVEDO, F. y colaboradores (1973): "Obtención de capas epitaxiales de Ge/Ge (111), (Ge-Si)/Ge (111) y Si/(Ge-Si)/Ge (111)", **Ciencias**, Serie 2, **Física**, No.17, marzo, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 3-14.
- (24) CERDEIRA, A. y colaboradores (1973): "Realización de transistores MOS canal p", **Ciencias**, Serie 2, **Física**, No.18, abril, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 3-17.
- (25) Comité Local del V Simposio Latinoamericano de Física del Estado Sólido, "Memorias", La Habana, 1975.
- (26) Boletín de la Comisión Cubana de la UNESCO, No. 57, año 14, Mayo- Junio 1975, p. 25.

(27) DIOS, MELQUIADES de (1974): "Dinámica de un electrón en un sistema de fonones", **Ciencias**, Serie 2, **Física**, No. 25, junio, Centro de Información Científica y Técnica de la Universidad de La Habana, 3-12.

EL LABERINTO DE LAS LEYES DE NEWTON

L. Hernández* y O. de Melo**, Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba

RESUMEN

En el presente artículo se analizan críticamente algunos aspectos relacionados con la enseñanza de las leyes de Newton en el nivel universitario. Se analizan sus contradicciones internas y se discuten los conceptos de sistema de referencia inercial, de espacio y tiempo absoluto, de campo e interacción instantánea.

ABSTRACT

Some critical aspects related to the teaching of the Newton's laws for under-graduated students are considered in the present article. The labyrinth of the ideas in the Newton's laws is presented and their internal contradictions are examined. The conceptions about inertial frame, absolute space and time, field and instantaneous interaction are discussed.

I. INTRODUCCIÓN

La teoría newtoniana del movimiento mecánico marcó, desde su surgimiento a mediados del siglo XVII, un hito en la Historia de la Humanidad. Fue la teoría más completa que existió entonces y aún en la actualidad posee una vigencia permanente. Hechos físicos que no satisfacen las leyes del movimiento de Newton se analizan con gran recelo; baste sólo mencionar la tan nombrada y actual *materia oscura* que no se puede detectar directamente observando la radiación electromagnética en algún rango, pero cuya existencia es inferida a partir de los efectos gravitacionales que causa en estrellas y galaxias. Por ejemplo, las galaxias cercanas a la Vía Láctea giran más rápido de lo que cabría esperar por la cantidad de materia visible que parece haber en ellas. Esta materia oscura da lugar al llamado "problema de la masa desaparecida" que es uno de los temas más debatidos de la cosmología moderna.

Con el surgimiento de la teoría newtoniana, la Humanidad se transformó radicalmente. A partir de entonces, la Ciencia y la Técnica se desarrollaron tan vertiginosamente que podría decirse que en cuanto a desarrollo tecnológico se refiere, la época newtoniana estaba más cerca de los romanos que de nuestros días. Newton con sus teorías logró por primera vez algo a lo que aspiran todos los pensadores: predecir el futuro. Él estableció que para un cuerpo cuyas propiedades (masa, carga eléctrica, volumen, etc.), posición y velocidad se conocen en un instante dado, es posible, a partir del conocimiento de las fuerzas que actúan sobre el mismo, determinar su posición y velocidad para cualquier instante posterior o anterior.

Newton resumió las leyes de la dinámica o del movimiento, en tres: la primera, o ley de la inercia donde incorporó las ideas de Galileo; la segunda que estableció como determinar los cambios de velocidad bajo diferentes interacciones llamadas fuerzas; y la tercera que ofrece una norma para las fuerzas: éstas cuando interactúan entre los cuerpos son iguales y opuestas, o lo que es lo mismo: la acción es igual a la reacción.

En el presente artículo se discutirán las contradicciones internas de las leyes de Newton; los conceptos de sistema de referencia inercial, de espacio y tiempo absoluto, de campo e interacción instantánea. Se mostrarán las dos ideas centrales de Newton: conocidas las fuerzas se puede determinar el movimiento de los cuerpos y la segunda, según la distribución dada de los cuerpos se pueden determinar las fuerzas que actúan sobre ellos. Se evidenciará que si bien la primera logró una solución relativamente completa, ya la segunda, con la ley de la gravitación, contenía en su solución una cierta incongruencia por principio: el concepto de la fuerza.

II. GALILEO, LA LEY DE LA INERCIA Y EL SISTEMA DE REFERENCIA INERCIAL

La primera y más bella teoría de la ciencia moderna fue la Mecánica: la ciencia del movimiento. Su historia en lo que a aportes decisivos y generalidades se refiere comenzó con Galileo Galilei que con sus geniales experimentos y extraordinaria capacidad de abstracción para abarcar los resultados cotidianos, realizó una renovación en las concepciones generales del movimiento. La Física de la primera mitad del siglo XVI respondía a la profunda convic-

E-mail: *(luisman@fisica.uh.cu)

***(omelo@fisica.uh.cu)

ción de que todos los fenómenos físicos se podían reducir al desplazamiento de los cuerpos. Las ideas físicas de Galileo representan una continuación relevante de los principales científicos que lo precedieron. Existen dos aspectos en la investigación de Galileo de carácter imperecedero: el enunciado del Principio de la Inercia y el descubrimiento de que la aceleración de la gravedad es la misma para todos los cuerpos en la vecindad de la superficie de la Tierra. La hipótesis de Galileo de la constancia de la aceleración de la gravedad en la vecindad de la superficie de la Tierra se opuso completamente al pensamiento aristotélico: “un peso dado cae una cierta distancia en un tiempo dado; un peso que sea mayor recorre la distancia en un tiempo menor estando en proporción inversa a los pesos. Así, si un peso es el doble que otro invertirá la mitad del tiempo para un movimiento dado”. La abstracción de Galileo fue inmensa. Es posible que si hoy se realizara una pesquisa entre la población, la idea de Aristóteles sería considerada como absolutamente verdadera para la gran mayoría de los encuestados. La leyenda narra que Galileo hizo su experimento sobre la constancia de la gravedad desde la Torre de Pisa, pero es poco probable que Galileo hubiera podido obtener un resultado experimental satisfactorio ya que la Torre (ya no tan inclinada) de Pisa, tiene una altura de sólo 55 m, y en aquella época era muy inexacto medir tiempos del orden de los segundos. Por supuesto que Galileo nunca pudo medir la caída libre en el vacío, pero el experimento le permitió a Galileo, con su gran genialidad, comprender la influencia del rozamiento del aire y estas ideas extenderlas a su Principio de la Inercia. Es por ello que se encuentra muy vinculada, la constancia de la aceleración de la gravedad con la inercia.

Para su Principio de Inercia, Galileo empleó planos inclinados en donde pudo comprobar que durante la caída, los cuerpos aumentan su velocidad, en tanto durante la subida de los planos esos mismos cuerpos disminuyen su velocidad. De aquí generalizó que el movimiento en un plano horizontal debía ser permanente, pues sería un movimiento sin aumento o disminución de la velocidad. Por supuesto, Galileo sabía perfectamente que tales movimientos horizontales nunca podrían ser permanentes en la práctica, pero comprobó que mientras más pulidas eran las superficies los cuerpos recorrían mayor distancia antes de detenerse. Es la misma abstracción que realizó para explicar la constancia de la gravedad durante la caída libre, eliminando el rozamiento del aire. De esta manera Galileo concluyó: una vez que un cuerpo posea una cierta velocidad, esta mantendrá su valor mientras no actúen sobre él interacciones de otros cuerpos que la modifiquen. Esto constituye el llamado Principio de la Inercia y fue incorporado por Newton en sus leyes del movimiento, denominándolo Primera Ley.

Muchos estudiantes cuando se inician en el estudio de la Mecánica se preguntan por qué es necesario incluir el Principio de la Inercia como Primera Ley, ya que esta podría estar incluida en la Segunda Ley, ya que esta podría estar incluida en la Segunda Ley, ya que esta podría estar incluida en la Segunda Ley: si sobre el cuerpo no se ejercen fuerzas, no hay aceleración y el cuerpo se mueve con velocidad constante o se mantiene en reposo. Pero Newton necesitaba el Principio de la Inercia para que su ley de la fuerza y en particular su teoría gravitacional fuera de carácter universal, es decir una ley válida no sólo para los terrícolas sino también para todos los posibles extraterrestres.

Sin embargo, el enunciado de la ley de la inercia que se presenta en los textos de mecánica no parece conveniente desde el punto de vista didáctico. Poco ha cambiado de la forma en que Newton la expresó: “Todo cuerpo persevera en su estado de reposo o movimiento uniforme hacia adelante, excepto en cuanto es obligado por las fuerzas impresas en él a cambiar su estado”. Newton tenía en mente un espacio absoluto con respecto al cual se podían especificar velocidades sin aclarar nada más. Él definía el espacio absoluto estableciendo que al transitar desde un punto del espacio a otro, cambian los procesos internos en el cuerpo que se traslada, sin importar cuales son los límites espaciales o qué cuerpos inmóviles se hallan en él. De manera tal que la posición de un cuerpo no está vinculada con los límites del Universo ni con otros cuerpos, sino con el mismo espacio donde se encuentra el cuerpo. Los cambios internos a que se refiere Newton están referidos a las fuerzas de inercia, que caracterizan los procesos mecánicos en un sistema que se mueve con aceleración y que modifican la conducta de los cuerpos en el sistema de referencia. Junto al concepto de espacio absoluto, Newton también desarrolló la idea de tiempo absoluto el cual es el tiempo independiente de la posición que ocupa el cuerpo en el espacio en el que se determina el tiempo. En fin, Newton era un convencido del movimiento absoluto que podía establecerse por los cambios internos en un cuerpo en movimiento.

Hoy se sabe que ese espacio absoluto no existe; que no está asociado ni al sol ni a las estrellas fijas y que además no hace falta para nada. Por tanto, referirse a un estado de reposo o de movimiento rectilíneo uniforme no dice absolutamente nada a no ser que se especifique con respecto a que sistema se está midiendo la velocidad. De hecho, una partícula (libre o no) podrá verse con cualquier velocidad o aceleración (dentro de los límites de la relatividad especial) siempre que escojamos un sistema adecuado a nuestro propósito. A la pregunta de cuales son los sistemas de referencia en los cuales ocurre lo que la ley de inercia dispone, se pudiera responder que estos son los sistemas inerciales. Pero enseguida se llegará a un círculo vicioso al tratar de definir estos sistemas inerciales.

La mayoría de los estudiantes que se enfrentan a un curso universitario de física ya tienen alguna noción de que, contrario a la propuesta aristotélica, la fuerza es responsable del cambio de la velocidad y no de la velocidad misma; sin embargo no consideran necesario especificar cual es el sistema de referencia. ¿Por qué? Porque todavía la mayoría de las personas y también los estudiantes que se inician en la física, siguen pensando en función del espacio absoluto de Newton. Y a cambiar esta forma de pensar no ayuda el enunciado de la ley de la inercia que se presenta en los cursos de mecánica.

La ley de inercia tiene dos aspectos importantes. El primero radica en que declara la existencia de ciertos sistemas de referencia donde todas las partículas libres se ven como si estuvieran en reposo o si se movieran con movimiento rectilíneo uniforme. Esto no es obvio. Obsérvese que por más extraño que nos parezca hoy, una ley de inercia aristotélica hubiera sido algo así como lo siguiente: “una partícula libre se desacelera hasta detenerse y una vez que se detiene la aceleración cesa.” Para partículas como esas no podrían encontrarse sistemas de referencia que las vieran a todas como estando en reposo o en movimiento uniforme. O sea, el hecho de que todas las partículas libres puedan verse en reposo o en movimiento uniforme desde un tipo determinado de sistema, representa en sí un cambio del mundo físico aristotélico al mundo físico galileano. El segundo aspecto es más práctico, constituye una definición de lo que conocemos como sistema inercial, que no tiene otra forma de definirse. Sobre la base de los argumentos anteriores sería más conveniente un enunciado como el siguiente: “existen sistemas de referencia (que llamaremos sistemas inerciales) con respecto a los cuales las partículas libres se encuentran en reposo o se mueven con movimiento rectilíneo y uniforme.” La importancia de estos sistemas radica en que una vez en ellos, todo cambio de la velocidad corresponderá con alguna acción. Esta acción es “real” y siempre que ocurra el cambio de velocidad encontraremos “una tierra que hala”, un “aire que retarda”, o un “cuerpo cargado eléctricamente que empuja.” Utilizando un sistema que no sea inercial, aparecerán “acciones” que no pueden achacarse a ningún cuerpo real y esto casi siempre hace el trabajo más complicado, y la formulación de las leyes físicas menos simple.

III. LA SEGUNDA LEY. LA FUERZA

Estudiando las ideas de Galileo, Newton se planteó nuevas preguntas en lo relativo a la inercia. Si en ausencia de toda interacción, la velocidad de un cuerpo es constante, entonces ¿cuál es la relación entre la fuerza y el movimiento? La fuerza, se respondía Newton, es la causa de la modificación temporal de la velocidad, o lo que es lo mismo, produce una aceleración sobre el cuerpo. Newton se basó en

la práctica y apoyado en sus grandes habilidades como experimentador, encontró que la relación entre la fuerza y la aceleración que producía, venía dada por la masa del cuerpo. Esta relación la conocemos como la Segunda Ley, $\Sigma \vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$, o en su forma más clásica, $\Sigma \vec{F} = m\vec{a}$.

Desde su descubrimiento, existió un gran debate en torno a si esta ecuación representa una verdadera ley o una mera definición de fuerza. Intentar definir la fuerza de manera independiente de la definición de masa sin hacer uso de la relación $\Sigma \vec{F} = m\vec{a}$ es un problema bien complicado. Definir la fuerza como la causa de la aceleración y luego establecer esta relación, $\Sigma \vec{F} = m\vec{a}$, como ley es algo que no satisface completamente.

El laureado con el premio Nobel de Física, R. P. Feynman en su famoso libro Lectures on Physics [1] escribe: “Preguntémonos, ¿cuál es el significado físico de la Segunda Ley de Newton, $\vec{F} = m\vec{a}$?, ¿cuál es el significado de la fuerza, de la masa y de la aceleración? Bien, nosotros podemos sentir **intuitivamente** (el resalte en negro es de los autores) el significado de masa y podemos *definir* la aceleración si conocemos el significado de la posición y el tiempo. Nosotros no discutiremos estos significados sino nos concentraremos sobre el nuevo concepto de *fuerza*”. Una manera muy pragmática de eludir el conflicto.

Un libro que trata en extenso de definir independientemente la fuerza de la masa y de la ecuación $\vec{F} = m\vec{a}$, es el escrito por los autores R. Portuondo y M. Pérez [2]. Ellos se basan en que “las interacciones de los cuerpos, y por tanto las fuerzas, no se manifiestan sólo por la modificación (aceleración) que causan en el movimiento de un cuerpo, sino también por las deformaciones que producen en estos. Estos efectos, la deformación y la aceleración correspondiente al cambio de velocidad, permiten hallar dos mecanismos para medir las fuerzas”. El intento es loable pues los autores pretenden definir la fuerza a partir de mediciones estáticas, valiéndose únicamente de las deformaciones que se producen en un resorte por la acción de una fuerza. Después, esta fuerza, ya definida, la emplean para producir variaciones de la aceleración en función de la masa y arribar a la ecuación $\vec{F} = m\vec{a}$. Esta tentativa de, por una parte definir la fuerza mediante experimentos estáticos, y por otra la segunda ley a través de experimentos dinámicos presenta sin embargo ciertos puntos confusos. En el enfoque, el bloque que se cuelga del resorte lo deforma y al justificar esta acción como fuerza, los autores asumen que “la Tierra atrae a los cuerpos con cierta fuerza, como lo demuestra el hecho de que estos caen acelerados

hacia el suelo (sistema inercial)". La Segunda Ley expresa precisamente que al aparecer una aceleración la causa es la fuerza, de manera que para calibrar la fuerza estáticamente los autores tuvieron que apoyarse en el concepto dinámico de la fuerza. Así, se postula el precepto **intuitivo** de que la fuerza es proporcional a la aceleración, conclusión a la que, mediante el experimento, se pretende arribar posteriormente. Además, para "demostrar" la ley de Hooke, $F = -kx$, punto de conclusión necesario para definir la fuerza de manera estática, se escribe: "adoptemos ahora un criterio que, por muy lógico o natural que parezca, no es más que un convenio o definición: aceptemos que para sostener dos bloques iguales, el resorte debe realizar una fuerza doble que la necesaria para sostener uno, y que la fuerza es, en general n veces mayor para sostener n bloques iguales que para sostener uno". En este criterio hay también algo de presentimiento al estilo de Feynman.

Los libros de Resnick y Halliday han sido utilizados mundialmente para el estudio de la física universitaria durante más de cuatro décadas. En su primera edición [3] los autores escribían: "Estos enunciados simplemente confirman nuestra aceptación **intuitiva** que la fuerza se considera como la causa de la aceleración. Sin embargo, para fines científicos, debemos hacer nuestra definición de fuerza exacta estableciendo un procedimiento para medirla". La definición exacta y su procedimiento para medirla se basa en la calibración de la fuerza en función de la aceleración que produce en un cuerpo patrón. En su cuarta edición [4], después de 30 años, los autores son más pragmáticos: "Desarrollemos nuestro concepto de fuerza definiéndolo operacionalmente. En el lenguaje cotidiano, una fuerza es un empuje o un jalón. Para medir tales fuerzas en forma cuantitativa, las expresamos en términos de la aceleración que determinado cuerpo estándar experimenta en respuesta a esa fuerza". Nuevamente llegan a la segunda ley calibrando la fuerza en función de la aceleración.

Es entonces $\Sigma \vec{F} = m\vec{a}$, ¿una ley o la definición de fuerza? Si fuera una elemental definición de fuerza serviría de poco porque con ella no se podría predecir hechos físicos o explicar los acontecidos. Sin embargo, la Segunda Ley nos ha mostrado su grandeza al explicar y predecir infinidad de hechos físicos. Newton respondió a la pregunta de ¿cuál es el significado físico de la fuerza?, desarrollando su teoría de la gravitación y con ella no sólo explicó el significado de una fuerza específica, sino que unida a la Segunda Ley pudo demostrar las leyes de Kepler y describir el movimiento de los planetas. Posteriormente a la ley de fuerza gravitacional se reportaron otras leyes aproximadas para las fuerzas: elástica, eléctrica, magnética, viscosa, fricción, etc.

La ley de la Gravitación Universal no tuvo sólo implicaciones cosmológicas al deducir las leyes de Ke-

pler, sino que tuvo una gran connotación en lo relativo al concepto de masa. Para la ley no es necesaria ninguna especulación o referencia a otra propiedad del cuerpo que no sea su masa y esto determina su universalidad, ya que cualquier otro atributo del cuerpo como puede ser su carga o densidad no se relaciona directamente con la fuerza gravitacional. Se sabe también experimentalmente, con un grado elevado de precisión que las masas gravitatoria e inercial de un cuerpo son iguales, esto significa que el valor de la masa utilizado en la ecuación de la ley de la gravitación es igual al valor de la masa del mismo cuerpo que se emplea en la Segunda Ley. Pero el aporte sorprendente de la genialidad de Newton fue considerar que la fuerza de interacción gravitacional es proporcional al producto de las masas. Estas "inspiraciones geniales" han constituido verdaderos motores impulsores del pensamiento científico y muy en particular de la Física.

Existen dos aspectos relativos a la Ley de Gravitación que aún intrigan a la comunidad de los físicos. ¿Cuál es el mecanismo físico que explica la atracción gravitacional? Imaginemos por un instante que en vez de existir la ley de atracción gravitacional existiera la ley de repulsión gravitacional. ¿Cómo se comportaría el Universo?, ¡ni pensarlo! Newton escribía en su gigante obra Principia: "Hasta ahora no he sido capaz de descubrir por el estudio de los fenómenos, la causa de las propiedades de la gravedad y no hago ninguna hipótesis acerca de ella. Es suficiente el hecho de que la gravedad existe y actúa de acuerdo a leyes establecidas, sirviendo correctamente para explicar el comportamiento de los cuerpos celestes y las mareas".

Otro aspecto desconcertante es la causa del por qué la fuerza de atracción gravitacional sea tan pequeña. Por ejemplo, si se toma la fuerza de repulsión entre dos electrones y se compara con la fuerza de atracción gravitacional entre ellos se tendría una relación igual a ¡ $4,17 \cdot 10^{42}$! Es un número inmensamente grande, pero es una constante de la naturaleza. Se espera que con la "Teoría del Todo" la "Ecuación Universal" contenga esta constante. Por el momento, una de las explicaciones más atractivas para revelar el pequeño valor de la fuerza gravitacional es la existencia de infinitos universos paralelos en la Teoría de la Membrana.

La Segunda Ley tiene sus límites de aplicación, pero esto es un problema intrínseco de cualquier teoría y no es de asombrarse que las leyes de Newton se incumplan en un campo no investigado por él. La suposición establecida por Newton de que el espacio y el tiempo eran absolutos limita el rango de aplicación de la ley a cuerpos que se desplazan a velocidades lejanas a las fotónicas. Igualmente, en el micromundo donde es válido el Principio de Incertidumbre no es posible el determinismo preestablecido por la Segunda Ley.

Casi toda la Física posterior se apoyó en el concepto de fuerza que aún se define o se establece prácticamente con las mismas palabras que utilizó Newton. La lógica de formulación de la Segunda Ley no es clara, ya que Newton empleó ideas intuitivas que él mismo nunca consideró como verdades establecidas, de aquí que algunos sean propensos a confundir la ley con la definición de fuerza. Pero no, la Segunda Ley es una ley con todas las de la ley.

IV. LA TERCERA LEY. LA ACCIÓN Y LA REACCIÓN

Si bien Newton no pudo definir la fuerza con el rigor que nos hubiera gustado y que pudo establecer sólo una ley, la fuerza de atracción gravitacional, si tuvo la gran sagacidad de expresar que las fuerzas operaban en pares, la acción y la reacción, que son iguales y opuestas, actuando sobre los cuerpos que interaccionan. Esta ley permite resolver numerosos problemas sin necesidad de conocer exactamente la ley de la fuerza.

De la ley de atracción gravitacional entre dos cuerpos de masa M_1 y M_2 se intuye claramente como funciona el par de fuerzas de acción y reacción, opuestas y actuando sobre cada cuerpo, tal y como se muestra en Figura 1. El suponer que ambas fuerzas poseen el mismo valor fue una idea genial de Newton. De hecho, a los que comienzan en el estudio de la física, hay que corregirles rápidamente su falso "sentido común" el cual le dice: que el cuerpo de mayor masa debiera ejercer una fuerza mayor sobre el de menor masa que la fuerza que ejerce el cuerpo de menor masa sobre el cuerpo de mayor masa. La fuerza de acción que ejerce la Tierra sobre un objeto es la misma que la fuerza de reacción que ejerce el objeto sobre la Tierra. Esta idea newtoniana es de gran abstracción y genialidad.

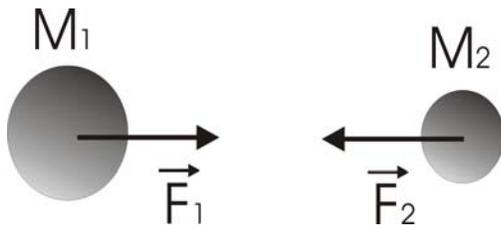


Figura 1. Interacción entre las masas M_1 y M_2 mostrando la ley de atracción gravitacional.

Pero la gran utilidad de la Tercera Ley aparece cuando están presentes más de dos cuerpos. Por ejemplo, en el caso de tres cuerpos como se muestra en la Figura 2, sobre el cuerpo de masa M_3 se ejerce una fuerza \vec{F} a la cual no le corresponde ninguna reacción. Pero si se conoce cuantos cuerpos están interactuando, esta fuerza por su carácter vectorial puede descomponerse en partes, siendo cada parte la interacción entre dos cuerpos cuya fuerza de interacción mutua es igual en magnitud y opuesta en dirección.

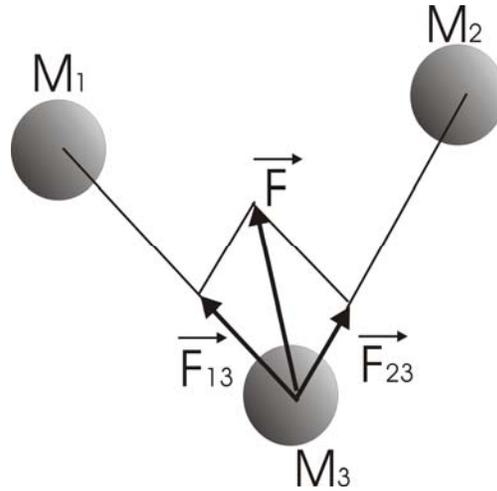


Figura 2. Interacción entre tres cuerpos.

El mismo procedimiento se engrandece cuando se tienen cuerpos con distribución continua de masas, así en el simple ejemplo que se muestra en la Figura 3, se analiza la interacción entre un cuerpo puntual o partícula de masa M_1 y una barra homogénea cilíndrica de masa M , de sección transversal A y longitud L que se encuentran separados una distancia H . La barra cilíndrica se divide en iguales diferenciales de masa dM y se halla su contribución a la fuerza que ejerce sobre el cuerpo M_1 . La fuerza resultante será entonces la suma de cada una de las contribuciones: $\vec{F} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2 + \vec{F}_3 + \dots$. Se puede inferir inmediatamente a partir de la Tercera Ley y sin necesidad de conocer la ley explícita de la fuerza de interacción, que si la altura H se encuentra en el punto medio del cilindro, la fuerza resultante sobre M_1 tendrá esa misma dirección. Bajo estas condiciones, la barra cilíndrica pudiera también considerarse como una partícula, concentrada su masa en el punto medio y separada de M_1 por una distancia $r = \frac{1}{2}\{LH/\arctan(L/4H)\}^{1/2}$. Cuando no coincidan el punto medio y la altura, la fuerza resultante estaría dirigida hacia la parte del cilindro con mayor masa.

La Tercera Ley también presenta sus contradicciones porque establece la fuerza mediante la interacción entre dos cuerpos, enfoque muy diferente al establecido en las dos primeras leyes. Por otra parte, es aceptado implícitamente que la interacción se transmite a velocidad infinita entre los cuerpos. Cualquier cambio de uno de ellos se "siente" instantáneamente en el otro, para que las fuerzas entre ellos sean iguales y opuestas en el mismo instante. La propagación "instantánea" es una buena aproximación cuando el tiempo de duración del cambio de posición de los cuerpos es grande comparado con el tiempo que emplearía una señal luminosa en recorrer ese desplazamiento. Esta condición se cumple satisfactoriamente cuando chocan dos bolas de billar pero no se satisface cuando colisionan dos partículas atómicas.

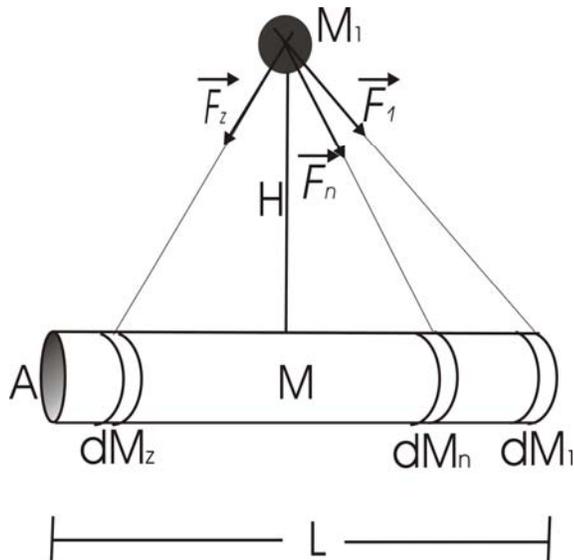


Figura 3. Interacción entre un cuerpo puntual de masa M_1 y una barra cilíndrica de masa M , de sección transversal A y longitud L que se encuentran separados una distancia H . La barra cilíndrica se divide en iguales diferenciales de masa DM y se halla su contribución a la fuerza que ejerce sobre el cuerpo M_1 .

Einstein modificó la Ley de la Gravitación de Newton incorporando la relatividad a la gravitación y estableciendo que no se podía propagar la interacción a velocidades superiores a la de la luz. La teoría einsteiniana de la relatividad además de desechar el modelo de acción a distancia demostró la inexistencia del éter y postuló el concepto de campo gravitacional. A partir de este concepto se considera que una partícula de masa M_1 modifica de "alguna manera" el espacio que la rodea, creando un campo gravitacional que a su vez, ejerce una fuerza de interacción sobre otra partícula de masa M_2 al cabo de un tiempo finito, que viene dado por la relación entre la distancia que separa los cuerpos y la velocidad de propagación de la perturbación. Según la Teoría General de la Relatividad, esta velocidad coincide con la velocidad de la luz.

Junto a la existencia del campo aparecen las ondas gravitacionales, perturbaciones en el espacio-tiempo que en teoría se propagan a la velocidad de la luz desde los lugares donde se acelera rápidamente una masa. Para detectar las ondas gravitacionales se necesita medir los cambios que ellas producen en el espacio-tiempo. El problema es que estas ondas son de naturaleza muy débil y la inexistencia de la radiación bipolar significa que solamente una pequeñísima fracción de energía mecánica de la fuente se convierte en radiación gravitacional. Se predice que las ondas gravitacionales más intensas producirían cambios en las dimensiones del espacio-tiempo menores de una parte en 10^{22} . Una comprobación experimental de las ondas gravitacionales

proporcionaría una ratificación más de la Teoría de la Relatividad, facilitándole a la Astronomía nuevas informaciones sobre el colapso de las estrellas, la interacción de los agujeros negros y la velocidad de expansión del Universo. La detección de estas ondas y su partícula asociada, el gravitón, es uno de los mayores retos de la actual física experimental y varios son los experimentos que se realizan en todo el mundo [5].

Como el concepto de campo se presenta tan artificioso como el del éter, los físicos siguen empeñados en encontrar un modelo que permita describir de manera más acertada las interacciones entre los cuerpos. En los últimos años se ha desarrollado la teoría de las supercuerdas buscando la Teoría del Todo que pueda unir en un sólo modelo todas las interacciones fundamentales de la naturaleza: gravitacionales, electromagnéticas, nucleares y débiles. En esta teoría, los átomos, ya no son átomos como pensábamos desde la época de Demo críto, sino vibraciones de una cuerda o membrana. Con el postulado de la oncenava dimensión en la Teoría de la Membrana, la Gravitación pudiera explicarse como intercambio de vibraciones entre membranas que se encuentran en universos paralelos. ¿En fin, vale la pena rechazar tantas "verdades" alcanzadas con teorías previas en aras de lograr la tan anhelada unificación de los campos?

V. CONCLUSIONES

Se discutieron las contradicciones internas de las leyes de Newton, los conceptos de espacio y tiempo absoluto, la interacción instantánea y el concepto de campo. Se mostraron las dos ideas centrales de Newton: conocidas las fuerzas se determina el movimiento de los cuerpos y la segunda, según la distribución dada de los cuerpos determinar las fuerzas que actúan sobre ellos. Se evidenció que si bien la primera logró una solución relativamente completa, ya la segunda, con la ley de la gravitación, contenía en su solución una cierta incongruencia, por principio: el concepto de la fuerza.

Se ha presentado el laberinto de las ideas en las leyes de Newton: ¿existirá un sistema de referencia inercial donde sea válida la ley fundamental de la dinámica?, ¿es la Segunda Ley una simple definición de fuerza?, ¿cuál es la naturaleza física de la gravitación?, ¿por qué la fuerza gravitacional es tan pequeña?, ¿qué es el campo gravitacional? Es muy probable que estas y otras interrogantes no pudieran responderse satisfactoriamente; pero de lo que si no hay dudas es que la teoría de Newton representó un momento cumbre del pensamiento humano y ha contribuido como ninguna al desarrollo impetuoso de la sociedad moderna.

REFERENCIAS

- [1] FEYMAN, RICHARD P.; ROBERT B. LEIGHTON and MATTHEW SANDS (1967) : Lectures on Physics.
- [2] PORTUONDO, RAÚL y MEDEL PÉREZ (1983): **Mecánica**. Editorial Pueblo y Educación.
- [3] RESNICK, ROBERT y DAVID HALLIDAY: Physics For Students of Science and Engineering, Part I, Second Edition (New York: John Wiley & Sons, Inc., 1962), pp. 1090, 1091.
- 4] HALLIDAY, DAVID; ROBERT RESNICK and KENNETH S. KRANE (2003): Physics, 4th Edition. John Wiley & Sons Inc / March 1992
- [5] HOUGH, JIM and SHEILA ROWAN (2005): **Physics World**, 18, 37.

REUNIÓN INTERNACIONAL ÓPTICA, VIDA Y PATRIMONIO

ASPECTOS GENERALES

La Reunión internacional Óptica, Vida y Patrimonio se realizó entre los días 27 y 30 de septiembre de 2004 en el Claustro Norte del Convento de San Francisco de Asís, en el Centro Histórico de la Ciudad de La Habana, Cuba. El evento fue organizado por la Sociedad Cubana de Física y el Comité Territorial Cubano de la Comisión Internacional de Óptica (ICO), como evento satélite de la V Reunión Iberoamericana de Óptica (RIO) y la VIII Reunión Latinoamericana de Óptica, Láseres y sus Aplicaciones (OPTILAS), celebrada en Porlamar, Isla Margarita, Venezuela, de 2 al 8 de Octubre de 2004, con objetivos temáticos mucho más amplios.

En la reunión se presentaron trabajos científicos en las siguientes áreas:

- Óptica y luz en las Ciencias de la Vida.
- Óptica e instrumentación láser en Biomedicina.
- Análisis ambiental por medio de la Óptica y el láser.
- Óptica, luz y espectroscopia en conservación y restauración del Patrimonio.
- Holografía en aplicaciones arqueológicas y museológicas. Óptica Arqueológica.

Este evento contó con la asistencia de 59 participantes de 10 países, de los cuales 36 fueron de Cuba, 4 de España, 3 de Italia, 3 de Japón, 3 de Argentina, 1 de Brasil, 3 de México, 2 de Alemania, 3 de Bélgica, y 1 de Polonia. Entre los participantes hubo 8 estudiantes nacionales. Se presentaron 17 conferencias, 11 sesiones orales y 24 carteles.

El evento recibió coauspicio, de algún tipo, por parte de las siguientes organizaciones nacionales e internacionales:

- International Commission for Optics (ICO).
- Optics within Life Sciences (OWLS).
- International Union of Pure and Applied Physics (IUPAP).
- UNESCO.

Organizaciones nacionales:

- ♦ Academia de Ciencias de Cuba (ACC).
- ♦ Centro de Estudios Aplicados al Desarrollo Nuclear (CEADEN).
- ♦ Instituto Superior de Tecnología y Ciencias Aplicadas (InSTEC)
- ♦ Oficina del Historiador de la Ciudad de la Habana (OHCH).
- ♦ Consejo Nacional del Patrimonio Cultural (CNPC).
- ♦ Universidad de la Habana (UH).
- ♦ Instituto de Reactivos (IMRE).
- ♦ Instituto Superior Politécnico "José A. Echeverría" (ISPJAE).
- ♦ Sociedad Cubana Para la Promoción de las Fuentes renovables de Energía y el Respeto Ambiental (CUBASOLAR).
- ♦ Cubaenergía.

Las universidades y centros de investigación nacionales cubrieron las cuotas de inscripción de la totalidad de participantes nacionales. Otros centros coauspiciadores colaboraron cubriendo parcialmente los gastos de insumos, libro de resúmenes e impresiones varias y pago de los locales, como es el caso de CUBAENERGÍA, el CEADEN y la Sociedad Cubana de Física. De organismos internacionales solamente se recibió ayuda financiera en efectivo de la Comisión Internacional de Óptica (ICO), con la cual fue posible apoyar cuotas de inscripción de algunos participantes latinoamericanos.

ACTIVIDADES PARALELAS A LAS SESIONES CIENTÍFICAS

En el marco del evento se realizaron dos exposiciones y un concierto. Una de las exposiciones fue la Exposición Internacional de Hologramas en temas de Vida y Patrimonio, la cual incluyó piezas de arte holográfico, retratos holográficos, hologramas arqueológicos, y hologramas de objetos históricos, y contó con piezas de conocidos artistas y especialistas en holografía.

La exposición estuvo abierta al público en la Casa-Museo del Barón Alejandro de Humboldt, muy cerca del convento, prolongándose durante todo el mes de noviembre, de manera que una gran cantidad de personas pudo admirar las piezas holográficas. Esta constituye la primera exposición internacional holografía realizada en Cuba, además de servir como elemento de divulgación de la ciencia Óptica y de importantes elementos culturales.

La segunda fue una exposición de obras de arte digital en temas de Vida y Patrimonio, como vínculo de las nuevas tecnologías y del tratamiento de imágenes y su incidencia en la cultura y el arte, contando con obras digitales de conocidos artistas nacionales y estuvo abierta a la población durante 10 días en la planta baja del convento de San Francisco de Asís.

El concierto de cuerdas se efectuó en el propio convento, por parte de afamados guitarristas, y compositores nacionales de reconocido prestigio.

CONCLUSIONES FINALES

El análisis final del evento Óptica, Vida y Patrimonio indica que se cumplieron los objetivos de dicha reunión. Además de las actividades científicas previstas se realizaron con éxito otras actividades paralelas, con un objetivo cultural que contribuyen a establecer un puente entre la ciencia y la cultura. En este sentido se debe resaltar la exposición internacional de hologramas que cumplió un objetivo de divulgación científica y cultural.

Se acordó como propuesta de los participantes que, los trabajos presentados al evento, fueran publicados en un número de la revista Cubana de Física preparado a este fin.

También se propuso considerar la realización nuevamente de este evento en un futuro cercano, ya fuera en Cuba o en otro país de Latinoamérica. Se valoró la posibilidad de mantener este evento como evento satélite de RIAO/OPTILAS, al menos durante sus primeras versiones, con el objetivo de consolidarlo. Aunque no se concretó la sede del próximo, se manifestó por parte de los cubanos la disposición de volverlo a organizar en nuestro país.

Creemos también que un aspecto positivo sería mantener el vínculo del evento con una exposición internacional holográfica.

La Sociedad Cubana de Física y el Comité Territorial Cubano de la Comisión Internacional de Óptica agradecen a todos aquellos que contribuyeron al éxito del evento. En especial, por su gran e incondicional apoyo, deseamos mencionar entre todos a la Dra. María Luisa Calvo, Secretaria General de la ICO, y al Dr. Gert Von Bally, Presidente Honorario de la OWLS.

*Dr. Ángel G. Augier
Presidente Comité Territorial Cubano ICO*