

FÍSICA

REVISTA CUBANA DE FÍSICA

Sociedad Cubana de Física
y Facultad de Física,
Universidad de la Habana

VOL.28 No.1
AGOSTO, 2011



UN PRODUCTO DE LA
INGENIERÍA FÍSICA CUBANA

Portada: Versión artística parcial del Relaxómetro de Resonancia Magnética cubano "Girolmag 3", puesto en funcionamiento en el Hospital "L. Íñiguez" de Holguín. El aparato fue completamente diseñado y construido en Cuba con una gran contribución de físicos e ingenieros físicos. Para mas detalle, ver artículo en la página 68.

EDITOR

E. ALTSHULER

Facultad de Física, Universidad de la Habana
10400 La Habana, Cuba
ealtshuler@fisica.uh.cu

EDITORES ASOCIADOS

A. J. BATISTA-LEYVA

Instec, La Habana
abatista@instec.cu

G. DELGADO-BARRIO

IMAFF-CSIC, Madrid
gerardo@imaff.cfmec.csic.es

O. DÍAZ-RIZO

Instec, La Habana
odrizzo@instec.cu

V. FAJER-ÁVILA

CEADEN, La Habana
vfajer@ceaden.cu

J.-P. GALAUP

Lab.A. Cotton(CNRS)& Univ. Paris- Sud
jean-pierre.galaup@lac.u-psud.fr

O. DE MELO

Facultad de Física, Universidad de La Habana
omelo@fisica.uh.cu

R. MULET

Facultad de Física, Universidad de La Habana
mulet@fisica.uh.cu

P. MUNÉ

Facultad de Ciencias, Universidad de Oriente
mune@cnt.uo.edu.cu

C. A. ZEN-VASCONCELOS

Univ. Federal Rio Grande do Sul
cesarzen@cesarzen.com

DISEÑADORES

DANIEL DÍAZ

ERNESTO ATÓN

E. ALTSHULER

EDICIÓN WEB

A. GONZÁLEZ ARIAS

arnaldo@fisica.uh.cu

R. CUÁN

rcuan@fisica.uh.cu

TODOS LOS ARTÍCULOS EN FORMATO ELECTRÓNICO SE ENCUENTRAN EN:

www.fisica.uh.cu/biblioteca/
revcubfi/index.htm

LA REVISTA CUBANA DE FÍSICA ES UNA PUBLICACIÓN SEMESTRAL DE LA SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA

COORDENADAS

- 2 TRAS 30 AÑOS DE EXISTENCIA DE LA REVISTA CUBANA DE FÍSICA: ¿QUÉ TENEMOS, Y QUÉ NOS FALTA? / E. Altshuler

ARTÍCULOS ORIGINALES

- 4 EMPLEO DE LA TÉCNICA "TIEMPO DE TRÁNSITO ULTRASÓNICO" PARA LA MEDICIÓN DE FLUJO SANGUÍNEO EN VASOS: RESULTADOS OBTENIDOS / A. Jiménez, E. Moreno, E. Carrillo y D. Torres
- 11 CONSTRUCCIÓN DE PANTALLAS HOLOGRÁFICAS CON DISPERSIÓN VERTICAL Y SU APLICACIÓN EN ESTEREOSCOPIA / J. J. Lunazzi, R. L. Serra Toledo y D. S. F. Magalhães
- 14 WEAK LOCALIZATION AND ELECTRON-ELECTRON INTERACTION IN THE LAYERED COMPOUND CuFeTe_2 / A. Rivas-Mendoza, F. González-Jiménez, J. M. Broto, H. Rakoto y J. González
- 18 PROCESOS TÉRMICAMENTE ESTIMULADOS EN EL SISTEMA CERÁMICO FERROELÉCTRICO $\text{Pb}_{0.88}\text{Sm}_{0.08}\text{TiO}_3$ / A. C. García-Wong, Y. González-Abreu, A. Peláiz-Barranco, Y. Gagou y P. Saint-Grégoire.
- 23 EFECTO DEL RUIDO INTRÍNSECO EN LA DINÁMICA DEL MÓDULO $p53\text{-Mdm}2$ / L. Cruz, N. Figueroa, R. Mulet y J. Piñero
- 28 DINÁMICA MOLECULAR CON TRANSICIONES CUÁNTICAS EN EL SISTEMA ArXeHg / R. Lozada-García y G. Rojas-Lorenzo
- 35 MODELACIÓN DE LA CONDUCCIÓN TRANSVERSAL EN COMPÓSITOS SUPERCONDUCTORES / A. Borroto, L. del Río y E. Altshuler
- 39 CdTe DEPOSITADO POR SUBLIMACIÓN ISOTÉRMICA A CORTA DISTANCIA EN CELDAS SOLARES CdS/CdTe / P. G. Zayas-Bazán, G. Contreras- Puente, G. Santana- Rodríguez, E. Hernández, O. Calzadilla, K. Gutiérrez, J. Sastre- Hernández y O. de Melo
- 45 TRAPPING, MANIPULATION AND RAPID ROTATION OF NBD-C8 FLUORESCENT SINGLE MICROCRYSTALS IN OPTICAL TWEEZERS / J. -P. Galaup, M. Rodríguez-Otazo, Á. G. Augier-Calderín, J. -F. Lamère and S. Fery-Forgues
- 49 EMPLEO DE LA MULTIMEDIA "ELECTROMAGNETISMO" EN EL INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE HUAMBO / Santiago García-Dally, Félix Martínez-Oliva, Juan Cruz-Arencibia, Ernani Manuel Almeida-Morguier y Ester Teresa Nazareth-Dias

ARTÍCULOS DE REVISIÓN

- 52 NEW-CONCEPT NANOSTRUCTURED SOLAR CELLS / E. Vigil
- 60 MICROFLUÍDOS: NUEVAS FRONTERAS / D. Fernández-Rivas

MOMENTOS DE LA FÍSICA EN CUBA

- 68 A 20 AÑOS DE LA PRIMERA MÁQUINA DE RESONANCIA MAGNÉTICA DE IMÁGENES CUBANA. UN PROYECTO DE INGENIERÍA FÍSICA Y BIOFÍSICA / C. Cabal

PARA FÍSICOS Y NO-FÍSICOS

- 73 A MEDIO SIGLO DE LA CONSTRUCCIÓN DEL PRIMER LÁSER / L. Hernández

- 77 CULTURA CIENTÍFICA Y PSEUDOCIENCIA / E. Pedrero

- 81 NUESTRA FÍSICA EN NOTICIAS

OBITUARIOS

- 84 SANTIAGO GARCIA - DALLY

TRAS 30 AÑOS DE EXISTENCIA DE LA REVISTA CUBANA DE FÍSICA: ¿QUÉ TENEMOS, Y QUÉ NOS FALTA?

E. ALTSHULER

Soy de los que cree que todo físico debe tener en su guardarropa una camisa de fuerza.

Es por ello que acepté con gusto –casi se podría decir que sugerí– convertirme en el nuevo Editor de la Revista Cubana de Física (RCF). Lo hice a pesar de las enormes dificultades a las que se enfrentan muchas publicaciones en nuestro país para salir en tiempo y forma. Aunque en realidad tomar las riendas de la revista también significaba heredar una historia de esfuerzos y logros que a continuación ejemplificaré con una anécdota.

Hace algún tiempo, durante una Feria de Ciencia para niños en la Escuela Superior de Física y Química Industriales de París, sostuve una breve conversación accidental con un desconocido –que a la larga resultó ser un físico chileno. Al enterarse que era cubano, me comentó sobre su interés en cierto evento científico que se había celebrado en la Habana hacía algún tiempo, y de cómo había estado bajando (o al menos intentando bajar) los artículos asociados al evento de la página web de la Revista Cubana de Física. Se trataba de *Rationalis'07*, cuyas memorias habían sido, en efecto, publicadas por la revista. No pude dejar de sentir orgullo, mas ciertamente no asombro, ya que las estadísticas indican que el de la RCF es un sitio web que recibe un buen número de visitas al año.

La creación del sitio web ha sido uno de los aciertos de la revista en los últimos años, como también lo ha sido haber actualizado su estilo. Pero el logro más importante lo constituyen, en mi opinión, haber sobrevivido a la crisis económica de los 1990's y haberse mantenido recibiendo material original de físicos cubanos y extranjeros, con una buena calidad científica –lo que en la jerga llamamos “tener colchón de artículos”. Eso puede parecer un asunto trivial, pero no lo es: como en muchos lugares del mundo en desarrollo, nuestros físicos desean la mayor visibilidad posible para sus resultados científicos, y en el mundo existen cientos de revistas de Física recogidas en prestigiosas bases de datos que tienen ventaja para recibir esos manuscritos.

Otro importante avance que ha tenido lugar en los últimos años ha sido el mantener al día la versión electrónica de la revista en su página web.

Estos méritos pertenecen, en buena medida, a la encomiable labor de la editora que me ha precedido, M. Sánchez-Colina, al presidente saliente de la Sociedad Cubana de Física, O. de Melo, al editor electrónico de la Revista, A. González-Arias, y por supuesto, a los editores asociados.

Lamentablemente, luego de un período de razonable estabilidad que duró hasta comenzar el año 2007, la versión impresa de la revista ha experimentado un serio retraso desde el 2007 asociado fundamentalmente al hecho de que la editorial con la que se había contratado la impresión (y que había funcionado bien en una primera etapa) resultó incapaz de mantener sus compromisos por falta de insumos.

De un modo u otro, a la altura del 2011, tras 30 años de existencia, la RCF se encuentra en un estado de madurez que nos compromete a intentar hacerla escalar el más alto peldaño posible en cuanto a visibilidad internacional. La meta natural es colocarla en las principales bases de datos a nivel global. Para comenzar, hace al menos un año se entregó una propuesta a *Scopus*, que ha sido respondida de forma afirmativa recientemente –otro importante logro que he heredado en calidad de editor. *Scopus*, sin embargo, hace varias recomendaciones, entre las que se encuentran mantener la regularidad de la publicación y la calidad de la producción, aumentar la “internacionalidad” de la revista en términos de autoría de artículos y de la membresía del Comité Editorial, así como disminuir el número de artículos “didácticos” en favor de artículos “de investigación”.

Resulta evidente que el próximo paso que certificaría la “madurez” de la revista, sería lograr colocarla en el *Science Citation Index* de Thomson-Reuters donde, hasta donde conozco, hay una sola publicación periódica del patio: la *Revista Cubana de Ciencias Agrícolas*. Esa base de datos es la que asigna el famoso “índice de impacto”, de modo que entrar en ella –junto con el ingreso a *Scopus*– puede desencadenar un proceso de citas tipo avalancha que probablemente aumentaría en gran medida la visibilidad de nuestra revista ante la comunidad científica internacional –y, como resultado “colateral”, la calidad del material en ella publicado. El mecanismo puede considerarse o no justo si se mira desde el “sur”, pero igual que las leyes de las competencias deportivas internacionales, no queda más remedio que acatarlo.

Nuestra investigación preliminar sobre las reglas que *Thomson-Reuters* exige para la inclusión de una revista en su base de datos comprende varios aspectos básicos, algunos de los cuales coinciden con las sugerencias de *Scopus*. Es vital lograr la *sistematicidad* de la edición e impresión de los números en copia dura: la revista debe ser impresa en tiempo y forma, y se exige demostrarlo de forma “contante y sonante”.

Otro tema importante es *lograr el mayor número de citas posible* de los artículos de la RCF en revistas que sí están “indexadas” en bases de datos importantes. Para ello, la mayor fuerza motriz es la *calidad* de los artículos en la revista, pero también que sean citados apropiadamente, siguiendo un sistema homogéneo, para facilitar su búsqueda electrónica. Mi propuesta es utilizar siempre, a la hora de citar artículos de la RCF, la abreviatura “*Rev. Cub. Fis.*”, y no otra.

Igualmente importante es el idioma: *Thomson-Reuters* favorece, naturalmente, el inglés. Sin embargo, están dispuestos a aceptar otros idiomas si la revista en cuestión demuestra su importancia específica para la comunidad de físicos local o regional que hablen el idioma. Como sabemos, la RCF acepta artículos en español y en inglés. Aunque se pudiera sugerir a los potenciales autores que envíen artículos en inglés, soy de la opinión que en nuestra revista fundamental de Física debe dominar el castellano.

Sin embargo, creo que sí se pueden llevar a cabo una serie de transformaciones que, sin hacer perder la esencia de la revista, fortalezcan su papel como espacio donde los físicos cubanos no sólo publiquen sus artículos “técnicos”, sino que se convierta una plataforma donde se discutan asuntos de importancia para la Física en nuestro país. Ello sería conveniente no sólo para seguir las sugerencias de *Thomson-Reuters*: nuestra comunidad necesita de tal plataforma. En éste número hemos introducido varias de esas secciones.

Para comenzar, la propuesta incluye una sección sistemática de tipo “editorial” como ésta, en la que se escriban ensayos cortos sobre asuntos de interés para la Física, en especial la Física en Cuba. Además de los artículos de investigación original –que deben seguir siendo nuestro “plato fuerte”– se propone publicar, sobre bases regulares, trabajos de corte histórico en la sección *Momentos de la Física en Cuba*, que ya estamos sacando a la luz en éste número. La sección *Para físicos y no-físicos* –también incluida en este número– podría recoger eventualmente artículos de filosofía y metodología de la ciencia y un mínimo de artículos de divulgación. La idea es que estas dos últimas secciones no ocupen demasiado espacio en la revista, y que domine la tendencia de *solicitar* a ciertos autores artículos sobre temas de interés, que es la tendencia también en el caso de los trabajos de revisión –los cuales tendrían sección aparte. En la medida de lo necesario, se propone continuar con la sección de *Obituarios*. Igualmente, valdría la pena reseñar mínimamente las tesis de doctorado en ciencias físicas que se hayan defendido en Cuba dentro del pe-

riodo correspondiente en la sección “Nuestra física, en noticias”, donde también pueden incluirse reseñas de eventos científicos en Cuba, etc.

Tal apertura del diapasón de la revista no debe alarmarnos en modo alguno: *Physics Today*, la revista “proa” de la *American Physical Society* (APS), incluye muchas secciones parecidas. Desde luego, no publica artículos de investigación originales (esa tarea está en manos de sus “hermanas” dentro de la estrategia editorial de la APS). Como en nuestro caso no nos podemos “dar el lujo” de publicar revistas para diferentes cosas, debemos ser ahorrativos en espacio para que todo quepa armónicamente en la RCF (como hacen, por cierto, *Nature* y *Science*). Con vistas a poder colocar más artículos técnicos, estamos promoviendo una sección de *artículos cortos* o “comunicaciones”, que comenzarían a salir en números posteriores.

Finalmente, *Thomson-Reuters* (al igual que *Scopus*) valora altamente el “internacionalizar” los comités editoriales de las revistas. A partir de éste número hemos reformulado la lista de editores asociados, incluyendo tres físicos extranjeros de reconocido prestigio, que dominan el idioma español, y que están bien al corriente de la Física en Cuba.

Finalmente, después del consejo de varios colegas y del impulso que la Universidad de La Habana está dando a éste tema, es posible que en los próximos años la RCF posea una versión electrónica (o “e-Journal”). Aunque esta “hermana gemela” tendría un nuevo ISSN, en el sitio web correspondiente se incluirían todos los números de la actual RCF, cuya propia personalidad no se perdería. De hecho, podemos ver este proceso como el cambio del actual sitio web hacia el sistema de origen canadiense *Open-Journal*, que contribuiría en gran medida a la automatización de una buena parte del proceso editorial, al estilo de las revistas más importantes del mundo. Es un proceso que duraría no menos de un año, durante el cual espero sinceramente que la *web* nacional adquiera una velocidad civilizada.

Para “envolver en celofán” nuestras propuestas, estamos lanzando, en este número, un nuevo diseño general de la revista –en el que juegan un rol principal los jóvenes diseñadores Daniel Díaz y Ernesto Antón. Aunque estoy consciente de la existencia de algunas pifias, me limitaré a citar la frase favorita de un colega: “lo perfecto es enemigo de lo bueno”.

Creo que si logramos instrumentar y estabilizar algunos de estos cambios, a la vez que encontrar una fórmula de producción que nos permita imprimir la revista en tiempo y forma, puede que tenga sentido, en una distancia de tiempo razonable, enviar a *Thomson-Reuters* nuestra propuesta para indizar la RCF. Espero, sin embargo, que ésta meta “tocable” no sea tan relevante en sí misma, sino que más bien funcione como subterfugio para afianzar las bien ganadas virtudes de la Revista Cubana de Física, y para llegar a convertirla en un verdadero electrocardiograma de la Física en Cuba.

EMPLEO DE LA TÉCNICA “TIEMPO DE TRÁNSITO ULTRASÓNICO” PARA LA MEDICIÓN DE FLUJO SANGUÍNEO EN VASOS: RESULTADOS OBTENIDOS

A. JIMÉNEZ†, E. MORENO, E. CARRILLO Y D. TORRES

Instituto Cibernética, Matemáticas y Física, ICIMAF, Ciudad de La Habana, antonio@icmf.inf.cu †
†autor para la correspondencia

Este trabajo trata sobre la medición de flujo sanguíneo en vasos [1], donde se emplea la técnica “Tiempo de Tránsito Ultrasónico” (TTFM), la cual permite medir el flujo volumétrico que atraviesa dichos vasos [2,3]. Entre sus aplicaciones más importantes está la medición del flujo en implantes coronarios del tipo Bypass o Puente, durante el proceso operatorio. Para ello, se diseñó un módulo electrónico cuyo principio de funcionamiento aparece registrado hace algunos años, y aun continúa siendo referenciado por fabricantes de equipos comerciales de muy alto costo, concebidos con la misma finalidad. Se describe dicho módulo, se exponen las características básicas del sensor empleado y se muestran los resultados preliminares de las mediciones efectuadas.

This work is related to the measurement of volumetric blood flow in vessels [1], where the “Transit Time Flow Measurements” (TTFM) technique is used [2,3]. The intraoperative flow measurement in Bypass or Bridge - type coronary implants, is one of the most important operations during the surgery process. For it, an electronic module was designed whose operation principles have been registered some years ago, and nowadays, they continue being mentioned by manufacturers of very high cost commercial equipments, conceived for the same purpose. The module is described, the basic characteristics of the employed sensor are exposed and the preliminary results of the practical measurements are shown.

Palabras Clave. Medidor de flujo 47.80.-, Ultrasonido *43.35.-c

INTRODUCCIÓN

Las enfermedades cardiovasculares constituyen una de las causas fundamentales de muerte a nivel global y en Cuba, se reportan también índices similares. Están frecuentemente vinculadas con los procesos que provocan la oclusión de los vasos sanguíneos, y un buen ejemplo de ello lo constituye la oclusión de los vasos que alimentan de sangre al corazón, conocidos como “las Coronarias”.

Consecuentemente, una de las soluciones médicas más eficaces aplicadas en ese sentido lo constituye la cirugía cardíaca de “Implante o de Puente”, conocida como “Bypass”, la cual contribuye al aumento de la esperanza de vida en personas con alto riesgo de infarto cardíaco [1]. Consiste en la colocación de un vaso sanguíneo del mismo paciente, de forma paralela a la arteria coronaria que posee oclusión (aterosclerosis). Estos procesos de oclusión se originan por diversas causas como son: el tabaquismo, la obesidad y el sedentarismo, entre otros factores de riesgo.

Sin embargo, una de las dificultades fundamentales asociada a este tipo de cirugía, aparece cuando se necesita conocer el flujo volumétrico sanguíneo que atraviesa el vaso injertado, durante el proceso quirúrgico. El poder medir la permeabilidad (circulación) a través del vaso, garantiza el éxito del proceso quirúrgico y reduce las posibilidades de complicaciones del paciente.

En la actualidad se emplean fundamentalmente dos técnicas basadas en el uso del Ultrasonido, para controlar la calidad

o efectividad del implante: la técnica Doppler y la técnica de Tiempo de Tránsito Ultrasónico (TTFM). La primera se emplea en la localización de vasos sanguíneos no visibles [1], para indicar la dirección del flujo y si este es de origen venoso o arterial y finalmente, sirve para detectar la posición y el grado de una posible estenosis.

Por su parte, la técnica TTFM cuantifica de forma precisa el volumen y el comportamiento del flujo que atraviesa un vaso [2], pudiéndose obtener a partir de este resultado otros datos de interés para el cirujano. Los equipos TTFM comerciales poseen un alto costo en el mercado internacional y paralelamente, mantienen una gran dependencia respecto al fabricante.

En el presente trabajo se exponen las características fundamentales del método de medición de flujo, así como su implementación, partiendo de la propuesta publicada por Drost, que aparece reflejada en dos publicaciones [2, 3]. En las mismas se demuestra que por características propias en el diseño del sensor empleado, se efectúan mediciones de flujo volumétrico las cuales no dependen en gran medida del perfil del flujo sanguíneo, de la geometría del vaso, ni de la alineación de este respecto a dicho sensor. La técnica que emplea TTFM se considera la de mayor exactitud y en la actualidad, se emplea como complemento indispensable en la verificación de los implantes coronarios, durante el proceso operatorio.

LA MEDICIÓN DE FLUJO SANGUÍNEO

El método TTFM, se basa en el tiempo que tarda en propagarse una señal ultrasónica a través de un medio líquido que fluye por un conducto (vaso sanguíneo), a favor y en contra, respecto al sentido de movimiento de dicho líquido. Es decir, se transmite un pulso ultrasónico desde el elemento piezoeléctrico transmisor del sensor, que viaja a través del medio líquido en un sentido y a continuación, es recibido por otro elemento piezoeléctrico receptor del mismo sensor. Seguidamente, el elemento transmisor pasa a ser receptor y el elemento receptor pasa a ser transmisor, repitiéndose nuevamente el ciclo.

Entonces, el tiempo que demora el Ultrasonido en viajar de un elemento piezoeléctrico a otro, en la misma dirección del flujo, se designa como t_d y el tiempo de viaje en sentido contrario como t_u . La diferencia de ambos tiempos $\Delta t = (t_u - t_d)$ depende únicamente de la magnitud del flujo volumétrico y no depende de la velocidad de propagación del ultrasonido en el medio.

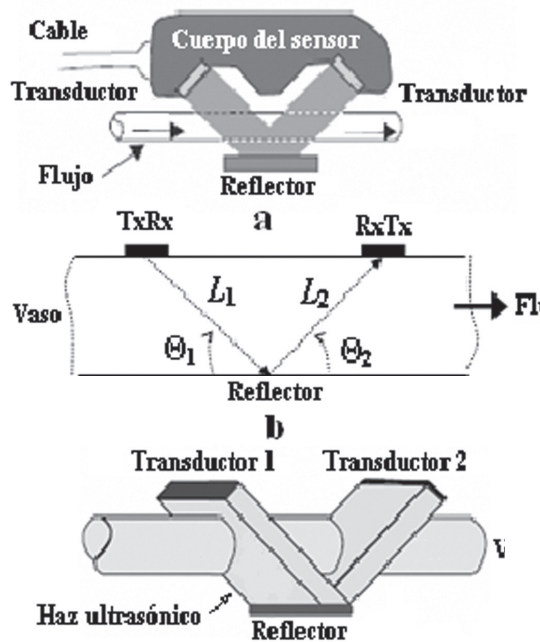


Figura 1. Sensor TTFM y su representación equivalente.

En la figura 1a y 1b aparece una representación del sensor empleado en la medición TTFM, donde se destacan los elementos piezo-cerámicos ultrasónicos TxRx y RxTx, el vaso sanguíneo a medir, un elemento reflector, las distancias recorridas por el Ultrasonido L_1 y L_2 , los ángulos de incidencia del haz ultrasónico θ_1 y θ_2 y la dirección del flujo.

Los elementos piezoeléctricos están situados de tal forma, que quedan alineados sobre el vaso a medir, teniendo ubicado un elemento reflector metálico frente a dichos elementos, de tal forma, que se producen reflexiones con un alto grado de precisión. En la figura 1a se observa la ubicación de los elementos piezoeléctricos y el reflector, como partes del sensor real. Los elementos cerámicos están inclinados un cierto ángulo θ res-

pecto al eje del vaso (45 grados), con el objetivo de inducir Ultrasonido en la dirección axial del mismo. El reflector permite la comunicación entre los elementos piezoeléctricos.

Algunas características en el diseño del sensor son necesarias tenerlas en cuenta para lograr un buen funcionamiento, las cuales se mencionan a continuación:

1 La longitud del elemento piezoeléctrico debe ser mayor que el diámetro exterior del vaso (figura 1c), lo cual garantiza un campo ultrasónico homogéneo que lo "cubre" completamente y esto asegura que todo el perfil del líquido que atraviesa el vaso, contribuye de forma integral a la medición de flujo volumétrico [3]; la parte del campo ultrasónico que no interactúa con el flujo, no aporta a la medición. Además, esta condición permite que pequeños movimientos laterales del vaso afecten en grado mínimo a la medición.

2 El flujo es atravesado por el ultrasonido dos veces, formando ángulos iguales respecto a la dirección del flujo, pero de signos contrarios (ver figura 1c). Como la componente axial de velocidad ultrasónica en el vaso sanguíneo depende del valor del ángulo de incidencia, se logra que la velocidad medida sea prácticamente independiente de pequeños movimientos de dicho vaso en la dirección axial y de la geometría de este, ya que ocurre una compensación en cuanto a los ángulos de las componentes vectoriales de la velocidad.

Entonces, partiendo de lo anteriormente expresado, asumiendo un perfil de velocidad del flujo uniforme y asumiendo que $L_1 = L_2 = L$, $\theta_1 = \theta_2 = \theta$ y $\cos \theta = \cos -\theta$ se tiene:

$$t_d = \frac{2L}{c + V \cos \theta} \quad (1)$$

y

$$t_u = \frac{2L}{c - V \cos \theta} \quad (2)$$

donde: c — velocidad de propagación del Ultrasonido en el líquido (sangre)

L — distancia recorrida por el Ultrasonido

θ — ángulo de incidencia del Ultrasonido

V — velocidad del flujo

Definiendo Δt como $t_d - t_u$ se tiene:

$$\Delta t = t_d - t_u = \frac{2L}{c - V \cos \theta} - \frac{2L}{c + V \cos \theta}$$

$$\Delta t = \frac{4VL \cos \theta}{c^2 - \left(\frac{V}{c}\right)^2 \cos^2 \theta}$$

Asumiendo que $V \ll c \Rightarrow \left(\frac{V}{c}\right)^2 \approx 0 \ll 1$ se obtiene:

$$\Delta t \approx \frac{4VL \cos \theta}{c^2} \quad \text{y finalmente:}$$

$$V \cong \frac{c^2 \Delta t}{4L \cos \theta} \quad (3)$$

Expresando c en función de t_d y t_u , y partiendo de las expresiones 1 y 2 se tiene:

$$c + V \cos \theta = \frac{2L}{t_d} \quad (4)$$

$$c - V \cos \theta = \frac{2L}{t_u} \quad (5)$$

Entonces, despejando c obtenemos:

$$c = \frac{(t_d + t_u)L}{t_d t_u} \quad (6)$$

Sustituyendo esta expresión de c en (3) se obtiene:

$$V \cong \frac{c^2 \Delta t}{4L \cos \theta} = \left[\frac{(t_d + t_u)L}{t_d t_u} \right]^2 \frac{\Delta t}{4L \cos \theta}$$

Operando y simplificando se obtiene:

$$V \cong \frac{L(t_u - t_d)}{t_u t_d \cos \theta} \cong \frac{L \Delta t}{t_u t_d \cos \theta} \quad (7)$$

donde se observa que la velocidad del flujo es una función lineal de la diferencia $(t_d - t_u)$.

De forma genérica, el flujo volumétrico que atraviesa un conducto viene dado por la siguiente expresión:

$$\phi = \iint_s V \cdot dS \quad (8)$$

donde:

Φ Flujo volumétrico

v Velocidad del flujo

dS Vector de superficie definido como:

$$dS = n \cdot dA$$

donde:

n Vector unitario normal a la superficie

dA Elemento diferencial de área

La ecuación 8 define convenientemente el flujo sanguíneo a medir, ya que el área transversal del vaso que es atravesada por el flujo, no es constante en todo momento. Adicionalmente, el perfil de velocidades del flujo que atraviesa dicha área transversal, es variable en el tiempo [4].

IMPLEMENTACIÓN DE LA MEDICIÓN TTFM

La implementación del método de medición TTFM se basa fundamentalmente en el principio propuesto por Drost [2], el cual es actualmente empleado en equipos comerciales destinados al mismo fin. Consiste en una

estructura circuital encargada de la emisión y la recepción del Ultrasonido que atraviesa el vaso sanguíneo, y para esto, se interconecta con el sensor ultrasónico. Además, amplifica convenientemente la señal recibida, extrae la información de fase que está en correspondencia con el movimiento del líquido que atraviesa el vaso y finalmente, produce una señal eléctrica a su salida cuya tensión es proporcional a la magnitud y dirección del flujo volumétrico que atraviesa dicho vaso. Existen otras opciones de implementación que emplean otras funciones equivalentes a las clásicas, por ejemplo, para aspectos del almacenamiento de las medidas, de la amplificación diferencial, etc [5].

En la figura 2 se muestra el diagrama de bloques del modulo electrónico implementado, donde un oscilador de 2 MHz. produce una señal continua que se amplifica convenientemente para poder excitar al elemento piezoeléctrico transmisor. El conmutador Q_1 conduce durante un tiempo dado y permite aplicar dicha señal de 2 MHz amplificada al elemento piezoeléctrico C_1 , el cual produce un tren de pulsos ultrasónico que se propaga por el flujo líquido hasta llegar al elemento piezoeléctrico C_2 .

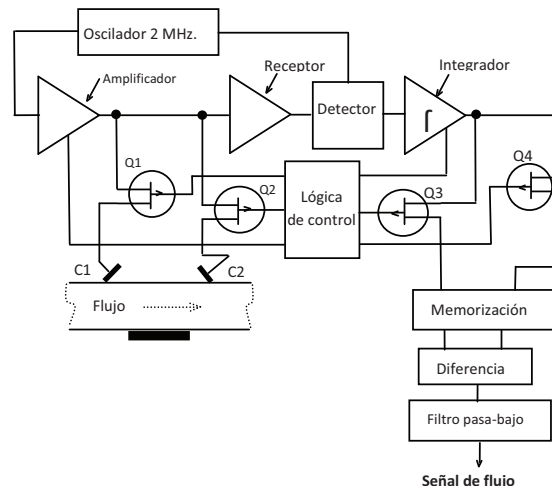


Figura 2. Diagrama de bloques de la implementación TTFM

A continuación, la lógica de control activa el conmutador Q_2 durante un tiempo, permitiendo que la señal ultrasónica que recibe el elemento piezoeléctrico C_2 , se convierta en una señal eléctrica que es enviada al receptor. El receptor amplifica convenientemente dicha señal, la digitaliza y finalmente la entrega al detector digital.

El detector digital compara esta señal que proviene del receptor con una señal de 2 MHz, proveniente del oscilador, obteniéndose a su salida un tren de pulsos, donde los tiempos correspondientes al nivel lógico 1 dependen del valor del flujo volumétrico y del sentido en que viaja el Ultrasonido. A continuación, la tensión de salida del detector se aplica a la entrada de un integrador, cuyo tiempo de integración está determinado por la lógica de control, y es menor que el tiempo de duración del tren

de pulsos. Entonces, una vez concluida la integración, el nivel de tensión a su salida se aplica a un dispositivo almacenador de tensión (sample & hold), mediante la conmutación de Q_3 , establecida por la lógica de control.

Ahora el proceso se invierte de tal forma, que el elemento piezoeléctrico C_2 pasa a ser el transmisor y el elemento C_1 el receptor. El almacenamiento se efectúa en este caso en otro dispositivo almacenador de tensión, mediante la conmutación de Q_4 . Seguidamente, las tensiones depositadas en cada almacenador se aplican a las entradas diferenciales de un amplificador operacional de precisión, cuya señal de salida varía linealmente en función de las variaciones de flujo volumétrico y finalmente, se introduce filtrado pasabajo para eliminar las componentes espurias de alta frecuencia, presentes a la salida del amplificador operacional.

VALIDACIÓN DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS

La validación de los resultados en las mediciones de flujo volumétrico, son un indicador fundamental de cómo el módulo electrónico es capaz de reflejar el comportamiento de las mediciones, lo cual depende en muy alto grado del sensor empleado. Las mediciones de flujo volumétrico se hicieron con el empleo de un fantom de flujo constante, diseñado para tal fin [6] y mostrado en la figura 3.

Calibración del fantom. De acuerdo con la figura 3, la medida del caudal (Q) en el segmento ab , se puede conocer me-

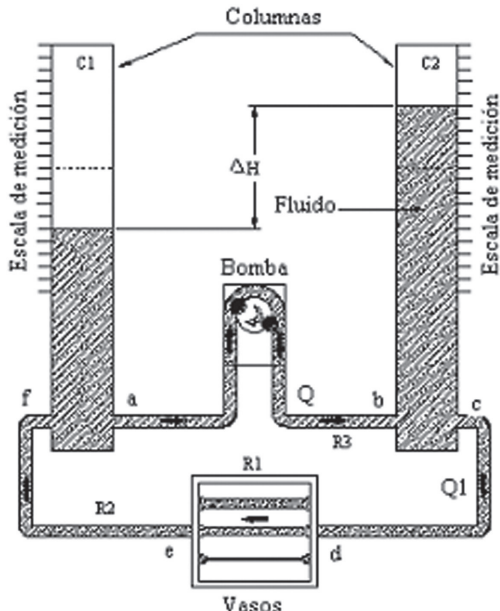


Figura 3. Representación esquemática del fantom para generar un flujo continuo. Las flechas indican el sentido de movimiento del fluido.

dante la medición del volumen expulsado por la bomba peristáltica en la unidad de tiempo. Asumiendo que la influencia de la resistencia al paso del fluido, al cruzar el segmento ab , sea despreciable, se tiene que el flujo Q es función de la tensión de alimentación del motor de la bomba (determina la velocidad de rotación del mismo), y del diámetro interno del tubo flexible empleado en dicha bomba.

En la calibración fueron utilizados: agua destilada a temperatura ambiente, dos recipientes, una balanza de precisión, un multímetro digital y un cronómetro. La medición de la tensión de alimentación fue hecha con una precisión de ± 0.01 Volt; la medición de volumen se efectuó pesando el volumen de agua bombeada en la unidad de tiempo (minuto), empleando para ello una balanza con precisión de ± 100 mg. y la precisión del cronometro es de ± 0.1 seg. Se usó el conducto tubular de diámetro interno 2 mm del fantom, de acuerdo con las dimensiones de los sensores a medir y en correspondencia con los diámetros reales de los vasos injertados durante el proceso operatorio.

La Tabla I muestra los valores experimentales promedio, obtenidos a partir de 3 juegos de lectura de flujo volumétrico Q y el nivel de tensión aplicado al motor de la bomba peristáltica. La figura 4 muestra el diagrama de regresión lineal, tomando en cuenta los datos que aparecen en la tabla I. La tabla II muestra los parámetros estadísticos obtenidos.

Tabla I			
Valores de tensión vs. flujo correspondientes a la calibración de la bomba peristáltica.			
Tensión (Volt)	Flujo (ml/min)	Tensión (Volt)	Flujo (ml/min)
2	21,50	9	129,87
2,5	30,76	9,5	137,45
3	39	10	143,88
3,5	47	10,5	150,9
4	54,64	11	158,7
4,5	62,5	11,5	166
5	70	12	174,8
5,5	77,52	12,5	181,8
6	84,74	13	190
6,5	93,75	13,5	197,6
7	101,35	14	204
7,5	108,7	14,5	211,86
8	116,28	15	219,3
8,5	123,83		

Según el margen de confianza obtenido, el phantom puede introducir un valor de dispersión promedio de flujo en las lecturas, dentro de un 99.87 % de probabilidad, de valor $\pm (3 * \text{error estándar})$, o sea, de aproximadamente ± 3.36 ml/min. Por ello, no permite efectuar calibraciones de una mayor precisión, pero sí una evaluación inicial del sistema.

Calibración para la medición. Para efectuar las calibraciones correspondientes a la medición, se emplearon tres sensores TTFM fabricados en el Departamento de Física Aplicada del ICIMAF, similares al mostrado en la figura 5. Las mediciones se efectuaron con los mismos valores de flujo empleados en la calibración del phantom.

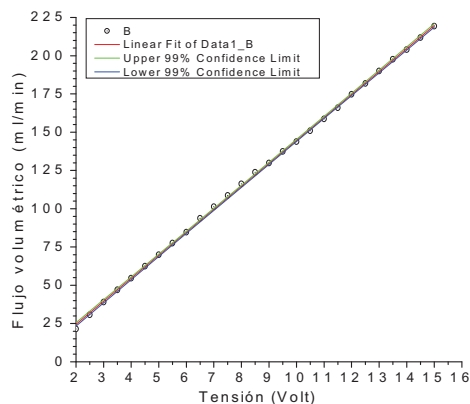


Fig. 4: Regresión lineal de los valores correspondientes al fantom.

Tabla II Valores estadísticos obtenidos en la regresión (fantom)	
Regresión lineal (ml/min)	$Y = 15.02X - 5.51$
Error estándar * 3 (99%) (ml/min)	± 3.36
Coefficiente de correlación	$R = 0.9998$
Coefficiente de determinación	$R^2 = 0.9996$

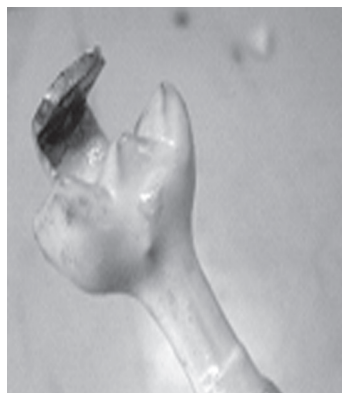


Figura 5: Muestra de un sensor ultrasónico TTFM fabricado en el ICIMAF.

Se monitoreó la tensión medida a la salida del módulo electrónico, cuyo comportamiento resultó ser directamente proporcional al valor del flujo volumétrico en los tres casos, como se esperaba. Dicha tensión fue medida en un osciloscopio con resolución de lectura de ± 50 mV, obteniéndose dos juegos de mediciones por cada sensor, los cuales fueron promediados y debidamente tabulados según muestra la tabla III.

Las figuras 6, 7 y 8 muestran las regresiones para cada sensor y sus datos estadísticos aparecen en las tablas IV, V y VI, respectivamente, asumiendo límites de confianza del 99 % de probabilidad [7]. Estos resultados indican que la relación flujo-tensión es fundamentalmente lineal, con coeficientes de correlación R muy cercanos a la unidad.

Tabla III Valores de tensión vs. flujo correspondientes a la calibración de los tres sensores empleados.			
Flujo (ml/min)	Sensor 1 (Volt)	Sensor 2 (Volt)	Sensor 3 (Volt)
21,50	0,5	0,2	0,15
30,76	0,55	0,3	0,25
39	0,6	0,4	0,34
47	0,73	0,5	0,4
54,64	0,8	0,57	0,5
62,5	0,9	0,66	0,55
70	1	0,8	0,65
77,52	1,1	0,85	0,75
84,74	1,2	1	0,83
93,75	1,3	1,05	0,93
101,35	1,4	1,1	1
108,7	1,5	1,2	1,1
116,28	1,57	1,3	1,2
123,83	1,63	1,4	1,25
129,87	1,8	1,5	1,35
137,45	1,9	1,6	1,4
143,88	2	1,7	1,5
150,9	2,1	1,8	1,55
158,7	2,2	1,9	1,66
166	2,3	2	1,73
174,8	2,4	2,1	1,85
181,8	2,5	2,2	1,91
190	2,6	2,3	1,95
197,6	2,7	2,4	2,05
204	2,8	2,43	2,1
211,86	2,9	2,5	2,2
219,3	3	2,7	2,25

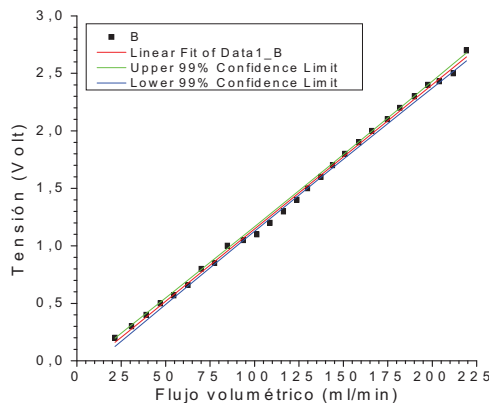


Figura 6: Regresión lineal correspondiente al sensor 1.

Tabla IV Valores estadísticos obtenidos en la regresión (sensor 1)	
Regresión lineal (ml/min)	$Y = 0.0125X - 0.108$
Error estándar * 3 (99%) (ml/min)	± 0.1014
Coefficiente de correlación	$R = 0.999$
Coefficiente de determinación	$R^2 = 0.998$

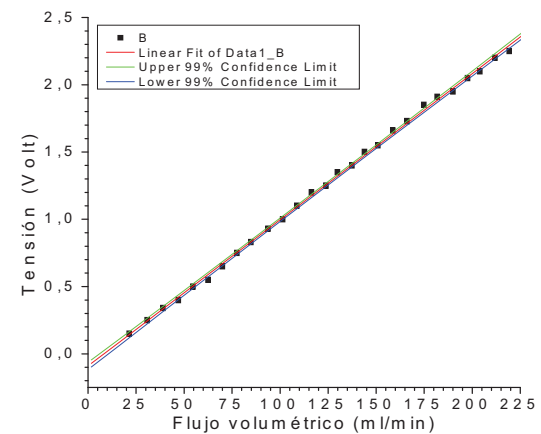


Figura 7: Regresión lineal correspondiente al sensor 2.

Tabla V Valores estadísticos obtenidos en la regresión (sensor 2)	
Regresión lineal (ml/min)	$Y = 0.0108X - 0.09$
Error estándar * 3 (99%) (ml/min)	± 0.0642
Coefficiente de correlación	$R = 0.999$
Coefficiente de determinación	$R^2 = 0.998$

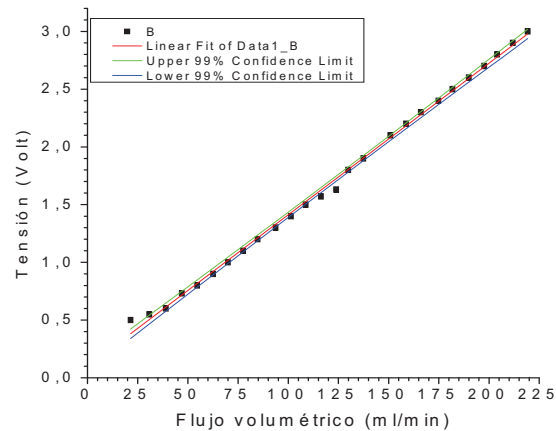


Figura 8: Regresión lineal correspondiente al sensor 3.

Tabla VI Valores estadísticos obtenidos en la regresión (sensor 3)	
Regresión lineal (ml/min)	$Y = 0.013X + 0.099$
Error estándar * 3 (99%) (ml/min)	± 0.1152
Coefficiente de correlación	$R = 0.999$
Coefficiente de determinación	$R^2 = 0.998$

De la información anteriormente expuesta se obtienen los valores de dispersión de flujo para cada sensor TTFM, tomando en cuenta un intervalo de confianza del 99 % de probabilidad. Entonces, evaluando las ecuaciones de regresión para cada sensor con un valor de flujo de 60 ml/min, se obtienen los límites de confianza respectivos para cada sensor, según se muestra en la tabla VII.

Tabla VII Límites de confianza para los tres sensores			
	Sonda 1 (ml/min)	Sonda 2 (ml/min)	Sonda 3 (ml/min)
(Error estándar * 3)	± 9.4	± 6.87	± 7.79

Restando el error introducido por cada sonda del error que introduce el phantom (± 3.36 ml/min) y promediando, se obtiene un error aproximado máximo de lectura $< \pm 5$ ml/min., que permite inicialmente efectuar mediciones en los implantes coronarios de manera aceptable, durante el proceso operatorio. La figura 9 ilustra una imagen de flujo pulsado, obtenido en el osciloscopio a partir del empleo de una bomba (fantom) de flujo variable, que simula aproximadamente los impulsos cardiacos.

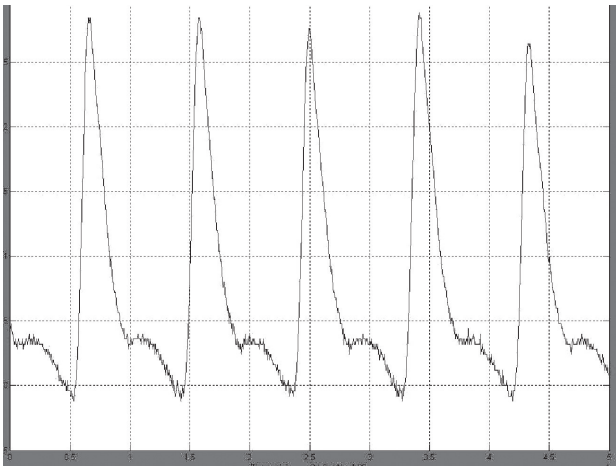


Fig. 9: Variaciones de flujo pulsado que simulan las pulsaciones cardiacas.

Resultado de la primera prueba clínica. El equipo fue evaluado durante una intervención quirúrgica en el hospital Hermanos Ameijeiras, obteniéndose los primeros resultados, similares a los de la calibración anteriormente mencionada. Las fotos de la figura 10 muestran lo expresado.

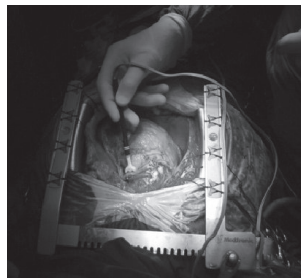
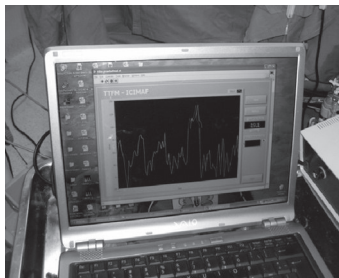


Figura 10. Pruebas efectuadas en el hospital "Hermanos Ameijeiras".

CONCLUSIONES

Este trabajo expone los primeros resultados obtenidos de la implementación circuital realizada para poder medir flujo volumétrico sanguíneo en vasos. Se han reportado desviaciones admisibles durante las pruebas de calibración efectuadas, de acuerdo con lo requerido durante el proceso operatorio (± 5 ml/min). Se recomienda repetir la calibración con niveles de flujo más precisos, emplear un mayor número de sondas TTFM y mejorar la construcción de las mismas, para reducir lo más posible las asimetrías que se introducen. Las respuestas son lineales, pero deben investigarse aspectos de referencia inicial en medidas de flujo dinámico.

Puede emplearse un dispositivo de tipo FPGA para sustituir la lógica del módulo electrónico y poder efectuar otras muchas funciones de forma más económica y automatizada.

Finalmente, queda demostrado que es posible desarrollar esta tecnología en aras de sustituir importaciones de alto costo y por ende, contribuir al desarrollo del Sistema Nacional de Salud

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos al proyecto "Sistemas Ultrasónicos y Computacionales para el diagnóstico Cardiovascular" (SUCODIC), proyecto Consorciado del Programa CYTED.

- [1] D. Ancona, "Intraoperative Graft Patency Verification: Should you trust your fingertips?", 2000 Forum Multimedia Publishing, L.L.C.
- [2] C. Drost, "Volume Flow Measurement System", United States Patent No. 4, 227,407, oct. 14, 1980.
- [3] C. Drost, "Vessel Diameter-Independent Volume Flow Measurement Using Ultrasound", Proceedings of San Diego Biomed. Symposium, San Diego CA: San Diego Biomed. Soc, Vol. 17, pp. 299-302, 1978.
- [4] Medi-Stim, "Adding a New Dimension to Intraoperative Guidance", Catálogo Informativo.
- [5] Transonic, "Flow-Based Intraoperative Coronary Graft Patency Assessment", Catálogo informativo.
- [6] Evans D.H., McDicken W., "Doppler Ultrasound: Physics, Instrumentation and Signal Processing, 2nd Edition, John Wiley & Sons, Ltd., 1999.
- [7] M.A. Krüger y F.A. Martins: "Manual de Phantom de Flujo Sanguíneo", Versión 1.0, diciembre/2007.
- [8] Murray Spiegel: Problemas de Estadística, Edición Revolucionaria 1971.
- [9] M. Feller, "Burst Mode Ultrasonic Flow Sensor", United States Patent No. 6,422,093 B2, July 23, 2002.

CONSTRUCCIÓN DE PANTALLAS HOLOGRÁFICAS CON DISPERSIÓN VERTICAL Y SU APLICACIÓN EN ESTEREOSCOPÍA

J. J. LUNAZZI^{a†}, R. L. SERRA TOLEDO^b, D. S. F. MAGALHÃES^a

a) Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidad Estadual de Campinas, Brasil;
lunazzi@ifi.unicamp.br, dsfmagalhaes@gmail.com

b) Departamento de Física, Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría, Cuba.
serra@electronica.cujae.edu.cu
†autor para la correspondencia

La estereoscopia es una técnica que permite la observación de imágenes tridimensionales, sin embargo está siempre asociada al uso de algún dispositivo especial para su visualización, como espejuelos bicolores o polarizados. Para el uso en aplicaciones médicas el empleo de estos dispositivos pudiera imposibilitar su utilización durante procedimientos quirúrgicos, por ejemplo. En este trabajo presentamos la descripción de la obtención de un nuevo tipo de pantalla holográfica que permitió el desarrollo de un estereoscopio para generación de imágenes tridimensionales sin el uso de cualquier dispositivo adicional. Describimos el sistema óptico del estereoscopio así como mostramos resultados de las imágenes visualizadas.

The stereoscopy is a technique that allows the observation of three-dimensional images, but it is usually related with the use of special devices to their visualization, such as bi-color or polarized goggles. In medical applications the use of these equipments could restrain their use in surgical procedures, for example. In this work we present the description that shows how to obtain the holographic screen that makes possible a stereoscope without using any other special device to generate three-dimensional images. We describe the optical system of the stereoscope and show the resulting images.

Palabras Clave. Pantallas holográficas 42.40. -i, Imágenes tridimensionales 42.30. Wb, Estereoscopia. 42.30 Va

INTRODUCCIÓN

La estereoscopia permite la visualización en tercera dimensión completa, es una técnica casi tan antigua como la fotografía y tiene aplicaciones en fotografía, en el cine[1], en la televisión[2] y en técnicas de levantamiento geodésico, por ejemplo. Esta técnica siempre necesita de espejuelos o visores especiales que limitan los movimientos de la persona que desea alternar su uso con la utilización de pantallas convencionales, como puede ser el caso de un cirujano durante la cirugía o un operador de tráfico aéreo. Eliminar la necesidad del uso de los espejuelos torna más higiénica la visualización para un número mayor de personas porque evita el uso de los mismos espejuelos para personas distintas o es más económico al no tener que utilizar un espejuelo para cada observador.

Las pantallas holográficas[3] son difusores direccionales difractivos donde el campo vertical de observación es extendido por el uso de un difusor durante su obtención.

Una de las variantes de la pantalla holográfica[3], elemento que está siendo desarrollado desde el año 1987[4-6], ofrece la posibilidad de su utilización para la creación de imágenes estereoscópicas en colores.

En este trabajo presentamos la descripción detallada del diseño utilizado para la obtención de esta nueva variante de pantalla holográfica, llamada Pantalla Holográfica Verticalmente Dispersiva

(PHVD). Describimos el sistema óptico que forma el estereoscopio desarrollado que permite la visualización de imágenes tridimensionales sin el uso de cualquier dispositivo adicional y mostramos las imágenes tomográficas obtenidas con este sistema.

DESCRIPCIÓN

Grabación holográfica de la Pantalla Holográfica Verticalmente Dispersiva

Para la obtención de la Pantalla Holográfica Verticalmente Dispersiva utilizamos la técnica holográfica de registro del interferograma en una película holográfica mediante la superposición de dos haces láser.

El diseño para su obtención es mostrado en la Figura 1. El haz colimado de un láser de He-Ne de 30 mW (L) es dividido por un divisor de haces variable (BS) y subsecuentemente cada haz es reflejado por un espejo plano (M). El haz de referencia llega al filtro espacial (SP) e ilumina la película holográfica (HF). El haz objeto se forma mediante una lente cilíndrica (CL) de distancia focal 3.8 mm que hace divergir el haz creando una línea difusora horizontal que llega al difusor (D). La línea difusora obtenida tiene como características fundamentales 6 mm de espesor y 200 mm de largo. El aumento del espesor de la línea difusora trae como consecuencia un aumento del campo de observación, por esto utilizamos una lente divergente (DL) inmediatamente después de CL. El elemen-

to que produce la difusión era una triple camada de nylon apretado entre dos láminas de vidrio fino. El ángulo empleado fue de 45° y las distancias eran $D\text{-HF} = (58.5 \pm 0.5)$ cm, $CL\text{-D} = (29 \pm 1)$ cm, $SP\text{-HF} = (237 \pm 3)$ cm. La distancia focal de referencia (eq.1) es determinada por la proyección normal a la película de las distancias $SP\text{-HF}$ y $D\text{-HF}$, z_r y z_o respectivamente, como muestra la Figura 2.

$$f = \left(\frac{1}{z_r} - \frac{1}{z_o} \right)^{-1} \quad (1)$$

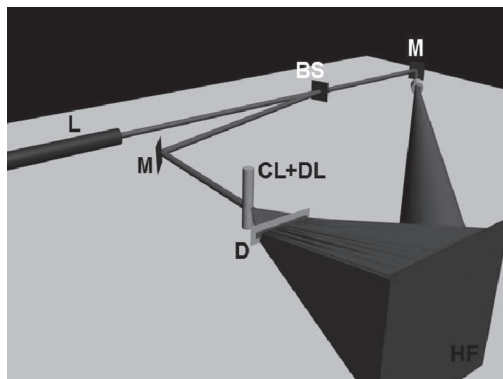


Figura 1: Diseño empleado en la obtención de la Pantalla Holográfica Verticalmente Dispersiva.

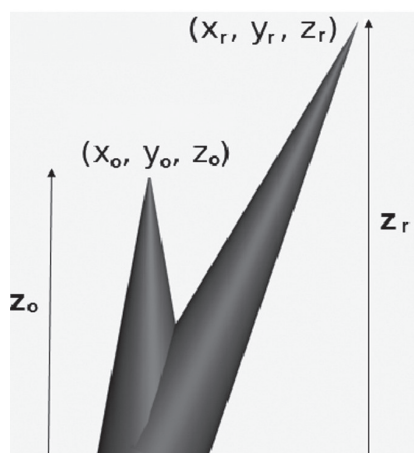


Figura 2: Determinación de la distancia focal de referencia en la Pantalla Holográfica Verticalmente Dispersiva.

Estereoscopio con Pantalla Holográfica

La pantalla holográfica proyecta en la posición del observador una distribución de luz que es la imagen holográfica del difusor utilizado durante la grabación holográfica.

En la Figura 3 mostramos como la Pantalla Holográfica Verticalmente Dispersiva posiciona esta imagen en función de la longitud de onda. Escogiendo tres colores del espectro continuo para ejemplificar, dejaremos la idea de los colores intermedios para el lector.

En la Figura 3 las imágenes se superponen solamente de forma parcial para ilustrar mejor la situación, posibilitando el entendimiento de que si el difusor usado fuera más grande, la región

de superposición sería también mayor, manteniendo los colores originales de la escena.

En la Figura 4 mostramos cómo deben ser colocados los dos proyectores en incidencia vertical, o sea, desde abajo o desde arriba, para que cada ojo del observador reciba solamente la imagen que proviene de cada proyector.

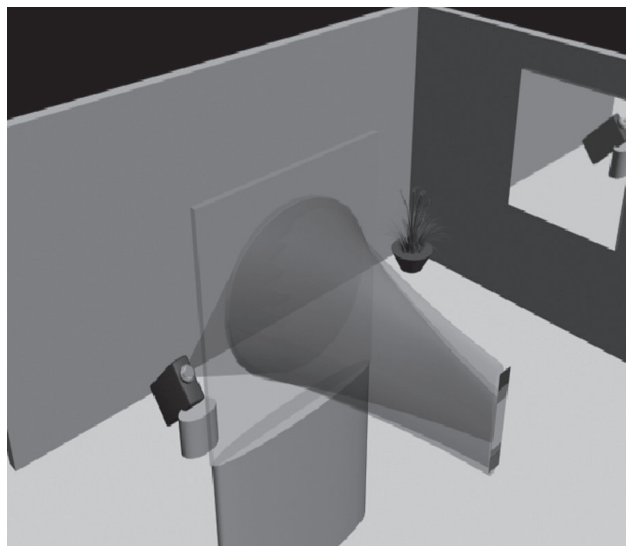


Figura 3: Posición de las imágenes del difusor como función de la longitud de onda. La iluminación ocurre desde abajo.

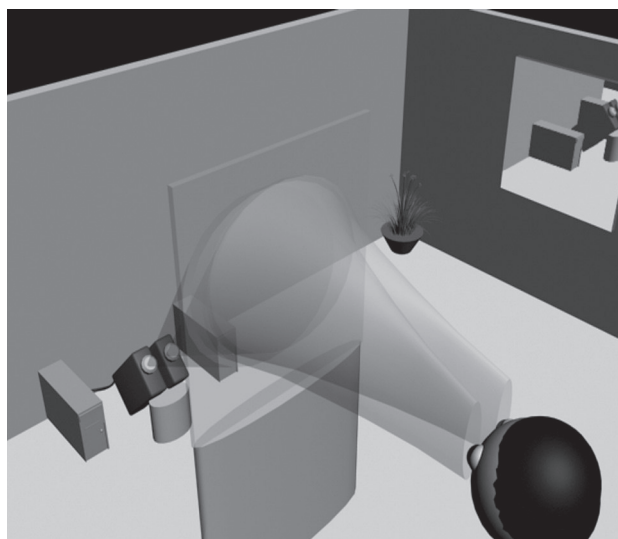


Figura 4: Proyección superpuesta en la pantalla de dos proyectores, cada uno generando un campo de visión diferente en la posición del observador.



La Figura 5: La distribución de luz que llega a los ojos del observador.

La diferencia de las posiciones laterales de los proyectores genera diferentes posiciones laterales para el campo del observador. La proyección oblicua genera el efecto trapecio, fácilmente corregible por los proyectores, sin embargo la oblicuidad lateral genera un efecto de distorsión diferenciado que es pequeño y que despreciamos en un primer momento.

Con la distancia focal obtenida en la grabación de la Pantalla Holográfica Verticalmente Dispersiva, el observador debe posicionarse a 2 m de la pantalla para que pueda visualizar la imagen debidamente focalizada.

RESULTADOS EXPERIMENTALES

Utilizando el diseño presentado hemos obtenido pantallas holográficas de 40 x 30 cm con eficiencia de difracción para el rojo de $(3,5 \pm 0,7) \%$ y 2 cm de extensión del campo horizontal de observación. El campo vertical de observación llega a 15 cm en el blanco.

Para la obtención de la imagen estereoscópica utilizamos dos proyectores Viewsonic modelo PJ503D, cada uno como un componente de la imagen estéreo, colocados en el piso a 1,2m de distancia de la pantalla. La pantalla y el observador estaban a la altura media de 1,2m. El observador tenía su posición más adecuada a 1,3m de la pantalla.

En la Figura 6 se muestra el par estéreo de una tomografía de cráneo. En la imagen de la izquierda se puede ver la visualización del ojo izquierdo y la imagen a la derecha muestra la visualización del ojo derecho.

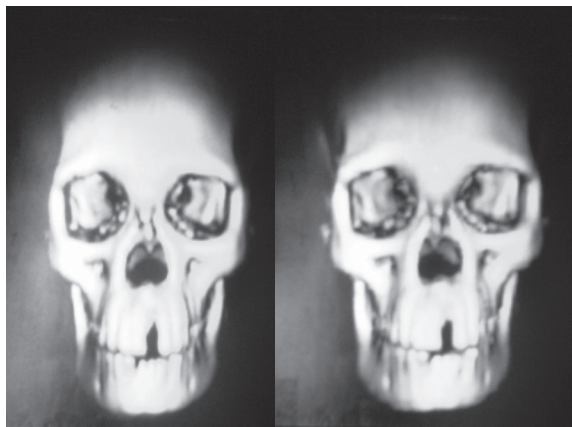


Figura 6. A la izquierda, visión de la pantalla por el ojo izquierdo. A la derecha, visión de la pantalla por el ojo derecho.

Esta imagen es vista en el color blanco, lo que muestra que este estereoscopio es capaz de producir imágenes en colores. La visión resultante es equivalente a la de un buen estereoscopio, considerando la resolución limitada que dispusimos en el momento de 800 x 600 pixels.

CONCLUSIONES

Con el sistema descrito en este trabajo se obtuvo un nuevo tipo de pantalla holográfica, clasificada como Pantalla Holográfica Verticalmente Dispersiva, con un área efectiva de 1200 cm² y eficiencia de difracción para el rojo de 3,5%.

Utilizando esta pantalla se pudo obtener un sistema estereoscópico generador de imágenes tridimensionales. Este sistema puede ser empleado para visualización tridimensional de tomografías sin el uso de cualquier equipamiento especial. La limitación del sistema radica en el reducido campo horizontal de visualización para el observador.

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Alexandre Falcão por las imágenes tomográficas y el software que las genera. A la familia Baumstein por la donación de elementos ópticos y de película holográfica.

- [1] U2 3D, Directed by C. Owens and M. Pellington, 2008
- [2] Hyundai E465S 3D Stereoscopic LCD TV. Disponible en: <http://www.koreatimes.co.kr/www/news/biz/2008/04/123_22514.html>
- [3] J. J. Lunazzi, "Procédé et dispositif pour projeter et observer des images différenciées ou stéréoscopiques, dessins, photographies, films cinématographiques ou vidéo", INPI-FR, No 8907241, 1992.
- [4] J. J. Lunazzi, P.M. Boone "3D image projection using large diffractive screens", SPIE 2333, Proc. of the International Symposium on Display Holography, Lake Forest, USA, 1994.07.15-18, p.449-453.
- [5] J. J. Lunazzi, M. Diamand, "Volume images vector display based on a diffractive screen", Optical Review, Vol. 6, No. 6 (1999) p.513-517.
- [6] J. J. Lunazzi, D.S.F. Magalhães "Descrição dos sistemas mais atuais de demonstração de imagens tridimensionais a olho nu, do papel das telas holográficas neles, e de sistemas pseudo-3D", encontro latinoamericano "LatinDisplay 2007", Hotel Nacional Inn, Campinas-SP-BR, 12-15 de novembro de 2007.

WEAK LOCALIZATION AND ELECTRON-ELECTRON INTERACTION IN THE LAYERED COMPOUND CuFeTe_2

A. RIVAS-MENDOZA^{a†}, F. GONZÁLEZ-JIMÉNEZ^b, J. M. BROTO^c, H. RAKOTOB AND J. GONZÁLEZ^d

a) Departamento de Física, Universidad de Carabobo, Valencia, Venezuela. aerivas1@uc.edu.ve†

b) Laboratorio de Magnetismo, Dpto. de Física, Ciencias, UCV, Caracas, Venezuela.

c) Laboratoire National de Champs Magnétiques Intenses, University of Toulouse, UPS, INSA, CNRS-UPR 3228, 143 Av. de Rangueil, F-31400 Toulouse, France.

d) Departamento de Física, Ciencias, ULA, Mérida, Venezuela

† autor para la correspondencia

El estudio de las propiedades eléctricas del compuesto laminar CuFeTe_2 indica que hay tres regímenes de conducción bien diferenciados dependientes de la temperatura. Por debajo de TSDW ~ 300 K se ha reportado la formación de un estado de Ondas de Densidad de Espín (SDW), en el marco de una transición metal no metal. Por debajo de 100 K ($\sim$ TSDW/3) el comportamiento de la resistencia eléctrica como una función de la temperatura y el campo magnético se atribuye a los electrones no condensados (cuasi partículas) en el estado SDW. A bajas temperaturas (1.8 - 20K), baja corriente (< 1 mA) y campo magnético ($0 < H < 6$ Tesla), los efectos de localización débil e interacciones electrónicas aparecen. A temperaturas intermedias ($20 < T < 100$ K) se observa un comportamiento de conductividad hopping.

The study of the electrical properties of the layered compound CuFeTe_2 shows that there are three well differentiated conduction regimes depending on the temperature. Below TSDW ~ 300 K the formation of a Spin Density Wave (SDW) state has been reported, in the frame of a metal to non metal transition. Below 100 K ($\sim$ TSDW/3) the behavior of the electrical resistance as a function of temperature and magnetic field is attributable to the still present not condensed electrons (quasi particles) in the SDW state. At low temperatures (1.8 - 20K), low current (< 1 mA) and magnetic field ($0 < H < 6$ Tesla), the effects of weak localization and electronic interactions in two dimensions appear. At intermediate temperatures ($20 < T < 100$ K) a hopping conductivity behavior is observed.

Palabras Clave. Localization effects 72.15.Rn, Hopping transport 72.20.Ee, Weak localization 73.20.Fz, Spin-density waves

INTRODUCTION

The systems of reduced dimensionality are the focus of attention of many studies in physics of the condensed matter. The electrons in these systems are confined to geometries that force them to strongly interact with each other, giving rise to a rich variety of behaviors and phase transitions. The free electron gas instability allows, at low temperatures, the appearance of states like superconductivity, or Charge Density Waves (CDW) or Spin Density Waves (SDW).

The SDW state, proposed by A. W. Overhauser in 1962[1], has been broadly studied in two prototypic families of materials, Cr and their alloys[2,3] and Bechgaard salts[4]. It has also been put in evidence that two dichalcogenide compounds, CuFeSe_2 (quasi-1D system, TSDW = 71 K)[5] and CuFeTe_2 (quasi-2D system, TSDW = 300 K)[5], present a SDW state. More recently thermodynamic and transport measurements in the layered compound Fe-oxypnictide, LaFeAsO , show a structural phase transition at $T_s = 155$ K, which has been associated with the formation of a SDW state[6].

The SDW state in CuFeTe_2 is supported by previous magnetic susceptibility, electrical resistance and Mössbauer spectroscopy measurements[5,7,8] in a sample prepared by the Bridgman vertical growth technique. A magnetic transition is observed at 308 K, with a Pauli paramagnetism behavior above this temperature. The ther-

mal evolution of the Mössbauer spectra between T_{SDW} and $T_{\text{SDW}}/3$ reflect the presence of the condensed state (a magnetically split wide distribution of hyperfine fields) and the normal state (a non magnetic contribution). A spectrum at low applied magnetic fields in the Pauli paramagnetic zone suggests the absence of localized magnetic moments on iron, confirming that the magnetic order observed is of itinerant origin. There is a metal to non metal transition, at $T_{\text{SDW}} = 300$ K, indicating the opening of a gap at the Fermi level. I-V measurements indicate a non linear electrical conductivity, which suggests the coexistence of two conduction channels, one associated with the normal electrons (ohmic conductivity) and the other one associated with the SDW state (non ohmic conductivity). This behavior is a consequence of the depinning and sliding of the SDW condensate[4].

The compound CuFeTe_2 crystallizes in a tetragonal structure with unit cell parameters of $a = 3.934$ Å and $c = 6.078$ Å (space group P4/nmm, No. 129)[9], formed by conductive planes of Cu and Fe cations and planes of Te anions, perpendicular to the crystallographic c-axis. The layered structure is shown in figure 1. The anions are arranged in a tetragonal deformed fcc sublattice. Each Cu or Fe atom is surrounded by four Te atoms in tetrahedral coordination. Two adjacent planes of Te atoms are separated by Van der Waals gaps (figure 1) that allow the cleavage in directions perpendicular to

the c-axis. The overlap of 3d Cu and Fe orbitals in the cation planes is expected (minimum separation between cations is 2.81 Å). Such atomic metallic planes can be considered as conducting sheets of, say, 2 Å thickness.

The electrical transport properties of CuFeTe₂ were initially studied by Vaipolin et al.[10] by means of resistivity measurements as a function of temperature. Between 4.2 and 500 K, $\rho(T)$ decreases two orders of magnitude, with a thermal variation given by $\rho(T) = cT^{-\beta} \exp(T_0/T)^x$ with $x \sim 1$ below 200 K.

F. N. Abdullaev et al.¹¹ have investigated the temperature dependences of the electrical resistivity of CuFeTe₂ semiconductor single crystals, parallel and perpendicular to the plane of the crystal layers, in the temperature range 5-300 K. The temperature dependence of the electrical resistivity presents two regions associated with different mechanisms of electrical conduction, thermally excited impurity charge carriers in the allowed energy band and hopping between localized states lying in a narrow energy band near the Fermi level.

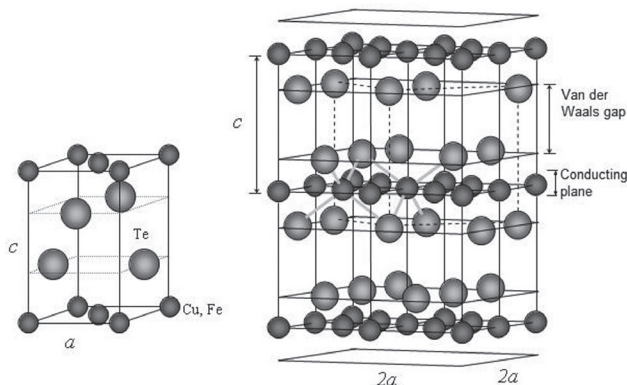


Figure 1. Crystalline structure of the CuFeTe₂ compound. Unit cell (left) and crystal (right).

In this work we present a detailed study of the compound CuFeTe₂ at low temperatures and high magnetic fields. In particular, we have measured the resistance as a function of the temperature along the conducting planes, as well as, the transverse magnetoresistance down to 1.8 K and up to 6 Tesla. The results suggest that the conduction in this system is determined by the effects of weak localization and electronic interactions in two dimensions.

2 EXPERIMENTAL TECHNIQUES

We have carried out a study of the electrical conduction on a new sample of CuFeTe₂ prepared by the standard melting and annealing technique of a stoichiometric mixture of each of the constituent elements. The layered sample obtained is of high quality, as it has been observed in the optical microscope, as well as, by x-ray diffraction. A monocrystalline sheet with a brilliant surface has been obtained by cleavage.

The measurements of the resistance as a function of temperature, between 1.8 and 290 K, and the magnetoresistance, in pulsed high magnetic fields up to 6 Tesla, were made in direct current (dc) using the standard four probe method. The sample selected for the study was approximately 0.35 mm thickness, cleaved (in

the plane a-b) directly from the original ingot. The electric contacts were made using gold wires of 25 μm and silver paint. Due to the layered structure of the compound, the electric contacts were placed on the edge of the sample. This allows a better current distribution in many conducting planes. The sample was covered with vaseline to avoid the oxygen contamination, known to take place between the Van der Waals gaps, which cause their deterioration and the appearance of jumps in the resistance. The results are reproduced very well in the different thermal cycles and in high magnetic fields, indicating the stability of the sample.

RESULTS AND DISCUSSION

Resistance vs temperature. Figure 2 shows the resistance as a function of temperature in log-log scale, between 1.8 and 290 K, for a current of 1 mA dc (ohmic regime). In the whole measurements interval a non metallic type behavior is appreciated, with a variation in $R(T)$ of one order of magnitude. There exist three well differentiated conduction regimes: low, intermediate and high temperatures. Above 20 K a smooth change in the resistance takes place, say $R(T) = R_0 T^\beta$, that can be attributed to hopping conductivity assisted by phonons. This dependence in temperature has been observed in CuFeTe₂ by Vaipolin et al.[9] and F. N. Abdullaev et al.[10]

The analysis of the $R(T)$ curve between 20 and 100 K by means of the logarithmic derivative technique $d(\ln R)/d(\ln T)$, allow us to determine the value of the parameter $\beta = -0.48 \pm 0.06$ (see insert of figure 2). On the other hand, the zero value of the slope in this figure indicates that thermal activation doesn't exist in this temperature range. Above 100 K the conduction in CuFeTe₂ is associated to the thermal evolution of the condensate fraction in the SDW regime[7], which decreases up to the non metal to metal transition (T_{SDW}), already observed in other samples of this system[7].

In the linear regime the condensate (the SDW) doesn't contribute to the conductivity. The SDW is pinned to the lattice by impurities, defects and imperfections, and only the non condensed electrons participate in the conduction. At low temperatures it is expected that only a small fraction of the conduction electrons is responsible for the behavior of the resistance in CuFeTe₂. The Mössbauer spectroscopy allowed us to observe simultaneously the fraction of condensed electrons (the magnetic SDW contribution to the spectra) and in the other hand the non condensed fraction (the non magnetic quadrupole doublet). The results indicate that almost 10% of the conduction electrons remain uncondensed at 4.2 K⁷.

Magnetoresistance. The magnetoresistance was measured at 1.8, 4.2 and 20 K, in pulsed magnetic fields perpendicular to the sheets (conductive planes). A dc current of 5 mA was applied parallel to the sheets. The results indicate a negative magnetoresistance in the whole range of magnetic field.

The negative behavior of the magnetoresistance can be associated to the effects of weak localization in disordered 2D systems. In systems with CDW and SDW this behavior has

been observed, which is an indication of the disorder existing in those compounds.

To estimate the values of the sheet magnetoresistance, R_s , we look the sample as a parallelepiped of $\approx 2 \times 1 \times 0.35 \text{ mm}^3$. If the sample is assumed to be formed by $0.35 \text{ mm} / 6.087 \times 10^{-7} \text{ mm} = 5.76 \times 10^5$ sheets in parallel, with, say, $d = 2 \times 10^{-7} \text{ mm}$ metallic width (cations planes) per sheet and per unit cell (cell parameter $c = 6.087 \times 10^{-7} \text{ mm}$), leading to a metallic effective thickness $t_{\text{eff}} = 5.76 \times 10^5 \times 2 \times 10^{-7} \text{ mm} = 1.152 \times 10^{-1} \text{ mm}$, which gives a resistivity $\rho = 2.57 \times 10^{-2} \Omega \cdot \text{cm}$ and a sheet resistance $R_s = \rho / d = 1.29 \text{ M}\Omega$ at 1.8 K.

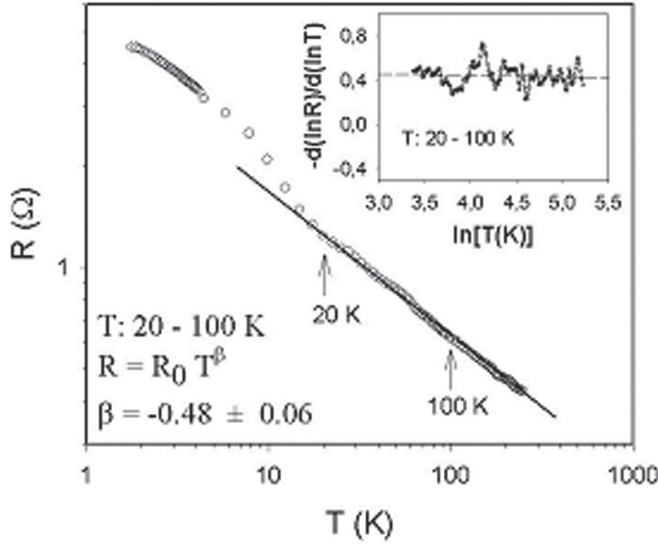


Figure 2. Resistance as a function of temperature in CuFeTe₂.

According to the weak localization model in two dimensions[12,13], the magnetic field dependence of the magnetoresistance is given by

$$\frac{\Delta R_s}{R_s^2} = \alpha \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} \left[\frac{1}{2} f_2 \left(\frac{H}{H_\phi} \right) - \frac{3}{2} f_2 \left(\frac{H}{H_2 + H_\phi} \right) \right] \quad (1)$$

where α is a parameter of the order of 1.

The characteristic fields H_ϕ and H_2 are defined as

$$H_\phi = H_i + 2H_s \quad \text{y} \quad H_2 = \frac{4}{3}(H_{so} - H_s) \quad (2)$$

and represent the different scattering mechanisms of the electrons, that is, inelastic (*i*), spin (*s*) and spin-orbit (*so*). The function f_2 is defined as

$$f_2(h) = \Psi \left(\frac{1}{2} + 1/h \right) + \ln h \quad (3)$$

here Ψ is the digamma function.

The perturbation theory calculations up to first order show that the corrections to the conductivity, of the localization and electronic interactions, are additive. There is a correction term

due to the electron-electron interactions which for 2D systems was calculated by P. A. Lee and T. W. Ramakrishnan[12] and is given by

$$\frac{\Delta R_s}{R_s^2} = \frac{F}{2} \frac{e^2}{2\pi^2 \hbar} g_2 \left(\frac{g\mu_B H}{k_B T} \right) \quad (4)$$

where F is the Coulomb screening factor, that can be calculated only in the free electron model. Taking the electronic density $\sim 5 \times 10^{20} / \text{cm}^3$ for CuFeTe₂, the value $F = 0.363$ is obtained.

The function g_2 is given by the integral expression

$$g_2(h) = \int d\Omega \frac{d}{d\Omega} \left(\frac{\Omega}{e^\Omega - 1} \right) \ln \left| 1 - \frac{h}{\Omega} \right| \quad (5)$$

where $h = g\mu_B H / k_B T$.

With the values of R_s as a function of the magnetic field for each temperature, and the value of F , the contribution of the electronic interactions was calculated and it was subtracted from the experimental data. The curves of the resulting magnetoresistance (due to the effects of weak localization) are shown in figure 3 (circles). The solid lines correspond to the fitting by means of equation 1. In the weak localization regime, when increasing temperature and magnetic field, the inelastic mean free-path l_i decrease and the electron becomes less located, and the resistivity of the system decrease.

The fitting parameters are α , H_ϕ and H_2 . The best fitting is achieved with $H_2 = 0$. We find $H_\phi = H_i = aT^p$ (see the insert in figure 3), with $a = 0.726$ and $p = 1.2$. This means that there are not contributions to the electron scattering by magnetic impurities ($H_i = 0$) or spin-orbit coupling ($H_{so} = 0$) and that the important mechanism is the inelastic scattering. The parameter values of the magnetoresistance are shown in Table I.

Table I				
Fitted parameters of the transverse magnetoresistance of the layered compound CuFeTe ₂				
$T(K)$	$R_s (\Omega)$	α	$H_\phi (Tesla)$	$L_{Th} (\text{\AA})$
1.8	1.29×10^6	0.65	1.429	107
4.2	947520	0.82	3.869	65
20	354240	1.16	23.803	26

The effects of weak localization in two dimensions appear if the thickness d of the metallic sheets is much smaller than the Thouless length L_{Th} , which is related to the characteristic field H_i by the expression[12]

$$H_i = \frac{\hbar}{4eL_{Th}^2} \quad (6)$$

The values of L_{Th} are indicated in the table 1. We can see that $L_{Th} \gg d$ ($d = 2 \text{ \AA}$ according to the layered structure shown in figure 1), therefore it is reasonable to consider the CuFeTe₂ as an almost-2D system in relation to the electronic localization phenomena.

The T^p behavior of H_f has been observed in many disordered systems, such $\text{Au}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ (with $p=2$) and Cu/Si [13] multilayers, as well as in metallic thin films of Cu [14], Ag or Ag-Pd . Another case is the organic conductor $(\text{DMtTSF})_2\text{BF}_4$, isomorphous to the Bechgaard salts (SDW systems), in which there were found effects of weak localization with $H_f \propto T$ ($p \sim 1$) [15]. In CuFeTe_2 we found $p = 1.2$. The value of p depends on the inelastic scattering mechanism at low temperatures. For the electron-phonon interaction $p = 5$, while for the s-d electron-electron interaction, $p = 2$. However, in metals with nesting in the Fermi surface a linear T scattering has been found[16], this could be the case of CuFeTe_2 , in agreement with the SDW state.

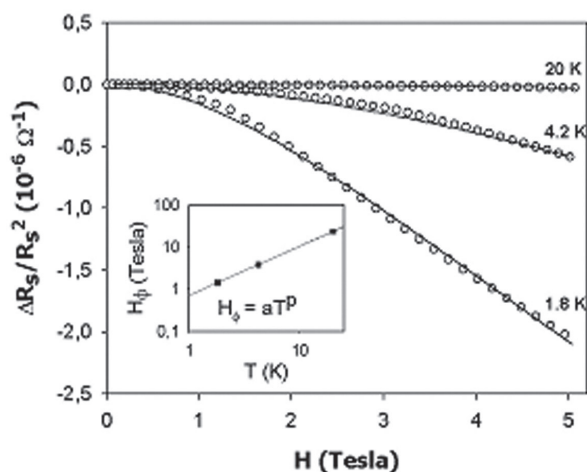


Figura 3. Transverse magnetoresistance of the CuFeTe_2 . Insert: characteristic field H_ϕ as a function of temperature.

CONCLUSIONS

The study of the electronic conduction at low temperature (down to 1.8 K), low current and high pulsed magnetic fields, performed for the first time on the layered compound CuFeTe_2 , indicates the presence of weak localization in the cation planes of the almost-2D structure, being the interactions between conduction electrons the fundamental mechanism of inelastic scattering. Between 20 and 100 K the conduction is of hopping type assisted by phonons, without thermal activation of the carriers. Above 100 K the behavior of the resistance is attributed to the decrease of the fraction of electrons condensed in the SDW state.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work has been supported by the PCP program "Nanosys-

tems and nanomeasurements" of the FONACIT (Venezuela) and the French government. Also partially supported by the "Alma Mater" program of the CNU-OPSU, Venezuela. The measurements were carried out in the Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses in Toulouse, France.

- [1] A. W. Overhauser, "Spin Density Waves in an Electron Gas", *Phys. Rev.* 128, 1437-1452 (1962).
- [2] E. Fawcett, "Spin-density-wave antiferromagnetism in chromium", *Rev. Mod. Phys.* 60, 209-283 (1988).
- [3] E. Fawcett, H. L. Alberts, V. Yu. Galkin, D. R. Noakes and Y. V. Yakhami, "Spin-density-wave antiferromagnetism in chromium alloys", *Rev. Mod. Phys.* 66, 25-127 (1994).
- [4] G. Grüner, "The Dynamics of Spin-density Waves", *Rev. Mod. Phys.* 66, No. 1, 1-24 (1994).
- [5] F. González-Jiménez, E. Jaimes, A. Rivas, L. D'Onofrio, J. González and M. Quintero, "New spin-density waves systems: Cu and Fe selenides and tellurides", *Physica B* 259-261, 987-989 (1999).
- [6] C. De la Cruz et al, "Magnetic order close to superconductivity in the iron-based layered $\text{LaO}_{1-x}\text{F}_x\text{FeAs}$ systems", *Nature* 453, 899-902 (2008).
- [7] A. Rivas, "Ondas de Densidad de Espín en el Compuesto Casi-2D CuFeTe_2 : Evidencia Directa de la Coexistencia de los Estados Normal y Condensado", Tesis Doctoral, Universidad Central de Venezuela, Caracas, Venezuela (2005).
- [8] A. Rivas, F. González-Jiménez, E. Jaimes, L. D'Onofrio, J. González and M. Quintero "SDW in the 2D Compound CuFeTe_2 ", *Hyperfine Interactions* 134, 115-122 (2001).
- [9] A. A. Vaipolin, V. D. Prochukhan, Yu V. Rud and V. E. Skoriukin, *Izv. Akad. Nauk. SSSR Ncorg. Mater.* 20, 578 (1984).
- [10] A. A. Vaipolin, S. A. Kijaev, L. V. Kradinova, A. M. Polubotko, V. V. Popov, V. D. Prochukhan, Yu V. Rud and V. E. Skoriukin, "Investigation of the gapless state in CuFeTe_2 ", *J. Phys: Condens. Matter.* 4, 8035-8038 (1982).
- [11] F. N. Abdullaev, T. G. Kerimova, G. D. Sultanov, and N. A. Abdullaev, "Conductivity anisotropy and localization of charge carriers in CuFeTe_2 single crystals with a layered structure", *Phys. Solid State* 48, No. 10, 1848-1852 (2006).
- [12] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, "Disordered electronic systems", *Rev. Mod. Phys.* 57, 287-337 (1985).
- [13] A. Audouard, A. Kazoun, J. M. Broto, G. Marchal and A. Fert, "Temperature and magnetic field dependence of the two-dimensional conductivity in $\text{AuSi}_{1-x}/\text{Si}$ and Cu/Si multilayers", *Phys. Rev. B* 42, 2728-2734 (1990).
- [14] C. van Haesendonck, L. van den Dries, Y. Bruynseraede and G. Deutscher, "Localization and negative magnetoresistance in thin copper films", *Phys. Rev. B* 25, 5090-5096 (1982).
- [15] J. P. Ulmet, L. Bachere and S. Askenazy, "Negative magnetoresistance in some dimethyltrimethylene-tetraselenafulvalenium salts: A signature of weak-localization effects", *Phys. Rev. B* 38, 7782-7788 (1988).
- [16] A. Virosztek and J. Ruvalds, "Nested-Fermi-liquid theory", *Phys. Rev. B* 42, 4064-4072 (1990).

PROCESOS TÉRMICAMENTE ESTIMULADOS EN EL SISTEMA CERÁMICO FERROELÉCTRICO $\text{Pb}_{0.88}\text{Sm}_{0.08}\text{TiO}_3$

A. C. GARCÍA-WONG^a, Y. GONZÁLEZ-ABREU^a, A. PELÁIZ-BARRANCO^{a†},
Y. GAGOU^b, P. SAINT-GRÉGOIRE^c.

a) Facultad de Física-Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana. San Lázaro y L, Vedado. La Habana 10400, Cuba; pelai@fisica.uh.cu†.

b) University of Picardie Jules Verne, LPMC, 80039 Amiens Cedex, France.

c) University of Nîmes, Department of Sciences and Arts, 30021 Nîmes cedex 01; ICGM (UMR CNRS n° 5253), C2M, 34095 Montpellier cedex 05, France.

†autor para la correspondencia.

El trabajo presenta el análisis y la discusión de los procesos térmicamente estimulados presentes en la cerámica ferroeléctrica $\text{Pb}_{0.88}\text{Sm}_{0.08}\text{TiO}_3$. Se abarca el estudio desde la temperatura ambiente hasta la temperatura correspondiente a la transición de fase ferroeléctrica-paraeléctrica. Se analizan los resultados correspondientes a la corriente piroeléctrica y a mecanismos de conducción debido a la presencia de vacancias de oxígeno.

This paper presents the analysis of the thermally activated processes of $\text{Pb}_{0.88}\text{Sm}_{0.08}\text{TiO}_3$ ferroelectric ceramics. The study has been carried out from room temperature to the ferroelectric-paraelectric phase transition temperature. The results corresponding to the pyroelectric current and the conduction mechanisms related to the oxygen vacancies are analyzed.

Palabras Clave. Efecto piroeléctrico 77.70.+a; Conductividad eléctrica 72.20.-i; Materiales ferroeléctricos 77.84.-s.

INTRODUCCIÓN

El desarrollo de nuevas aplicaciones en la industria ha sido posible gracias a los estudios realizados en diversos tipos de materiales, como es el caso de los materiales ferroeléctricos, los cuales son utilizados en sensores electromecánicos, donde controlan los mecanismos de seguridad en sistemas de entrada, en los interruptores de luz que responden a sonidos o movimientos, en diversas partes de los automóviles, en sonares, velocímetros, sistemas de visión nocturna, amplificadores de baja y alta impedancia, entre otras múltiples aplicaciones[1-3].

Entre los estudios más abordados en estos materiales se encuentra el relativo al fenómeno piroeléctrico, que ha derivado en un número importante aplicaciones, como por ejemplo los detectores piroeléctricos[4], los cuales son empleados en la detección de polución, el análisis de plasmas y gases, las pruebas electrónicas y la robótica, los detectores de incendios y de intrusos, los interferómetros, la alineación de láseres y el control de su potencia, los dosímetros, etc[5].

Una variación de la temperatura (T) en estos sistemas produce un cambio en la magnitud de la polarización eléctrica, induciéndose una separación de las cargas y una diferencia de potencial[5]. Este fenómeno se manifiesta con la aparición de una corriente eléctrica (I) entre los electrodos del material y es conocido como piroelectricidad. Al analizar el comportamiento de la corriente con la temperatura, se observa un incremento de la corriente hasta un valor máximo y su

posterior decrecimiento hasta la temperatura de transición (T_m) donde desaparece la polarización del material y por consiguiente debe anularse la corriente. Este tipo de comportamiento no es generalmente observado de manera independiente en los estudios experimentales de diversos materiales ferroeléctricos, evidenciándose valores de corriente no nula en T_m y por encima de ella[5]. Este hecho está dado con la activación de todos los procesos en el material con la temperatura, incluyendo los procesos conductivos, que pueden solaparse con la respuesta piroeléctrica.

Es por ello que en los estudios que se realizan se hace necesario separar las diferentes contribuciones para una adecuada interpretación de lo que sucede en el material en cuestión. Tratándose del análisis de la dependencia de la corriente con la temperatura en un amplio intervalo de temperaturas, que involucra todos los procesos que son activados con la variación de temperatura, se hablará entonces de un comportamiento más general que la corriente piroeléctrica, la corriente térmicamente estimulada.

Un proceso térmicamente estimulado (PTE) es aquel donde un material se calienta de forma controlada mientras que una o varias de sus propiedades físicas se registran de forma continua. Si el parámetro que varía es medido y analizado en función del tiempo o la temperatura, la curva que resulta nos puede brindar información sobre el proceso que ocurre en el sistema durante el calentamiento[6].

Una curva típica consiste en uno o más picos, cada uno relacionado con un proceso microscópico activado térmicamente. Los parámetros de estos procesos microscópicos suelen ser determinados a partir del número, forma y posición de los picos[6].

El primer paso en el análisis de una curva experimental de un PTE es encontrar una interpretación física de los posibles procesos que suelen ocurrir en el material en cuestión, determinando el modelo que mejor describe dicha curva. El segundo paso es el análisis de la curva en términos del modelo escogido, para evaluar los parámetros de cada proceso y de esta forma caracterizar al material.

En este trabajo se presenta el estudio realizado en la cerámica ferroeléctrica de titanato de plomo modificado con samario, utilizando dos métodos: el método del ascenso inicial y el método de la forma del pico. Ambos métodos fueron implementados en Mathematica con el objetivo de determinar, a partir de las curvas experimentales I-T, los valores de energía de activación para la evaluación de los procesos que se evidencian en el material en el estado ferroeléctrico.

MODELOS TEÓRICOS.

Método del Ascenso Inicial.

El método del ascenso inicial consiste en el tratamiento de la curva de corriente térmicamente estimulada en un intervalo de temperaturas inferior a la temperatura correspondiente al máximo del pico. Para esta región se considera que la corriente (I) presenta una dependencia de tipo Arrhenius con la temperatura (T) dada por la siguiente expresión[6]:

$$I = Ae^{-E_a/k_B T} \quad (1)$$

donde A es una constante, E_a es la energía de activación, T es la temperatura y k_B es la constante de Boltzmann[7].

Al graficar $\ln I(T)$ vs. $1/T$ para un intervalo pequeño de temperaturas, donde se cumple la condición de ascenso inicial según la ecuación (1), se debe esperar una línea recta con pendiente $m = -E_a/k_B$, la cual nos da una vía inmediata para el cálculo de la energía de activación[6, 7].

En el programa implementado en Mathematica se creó una función que separa los datos experimentales en intervalos donde solo se encuentre un pico. Se obtienen las pendientes que ajustan a los valores de $\ln I(T)$ vs. $1/T$ para cada intervalo previamente escogido, comenzando con los dos primeros valores del intervalo hasta el último, incrementando los puntos experimentales de uno en uno. Con estos valores de pendiente se calculan las energías de activación, así como los valores de desviación estándar en cada caso[7].

Para escoger el valor de la energía de activación, asociado al proceso en cuestión, se toma en cuenta el criterio que la desviación estándar no varíe notablemente al ir aumentando el número de puntos[7].

El método del ascenso inicial posee una ventaja importante comparado con otros métodos; en el intervalo de ascenso inicial las mediciones resultan dependientes solamente de la temperatura y no de la razón de calentamiento. Esto permite utilizar una razón de calentamiento relativamente pequeña, eliminando o reduciendo los problemas relacionados con diferencias de temperaturas entre la muestra y la punta del termopar, o gradientes de temperatura en la muestra[6].

Método de la Forma del Pico

Existen varios métodos para el cálculo de la energía de activación en los cuales se analiza la forma del pico[6,8]. En ellos se utilizan los puntos que corresponden a la temperatura en el máximo de intensidad de la corriente, es decir la temperatura del pico (T_p), y las temperaturas en las que la intensidad máxima de la corriente a ambos lados de la curva es la mitad (T_1 y T_2). Las expresiones reportadas para el cálculo de la energía de activación dependen en cada caso del intervalo de temperatura utilizado. La Figura 1 muestra un ejemplo de una dependencia I vs T, donde se señalan los correspondientes parámetros de interés para el análisis mediante el método de la forma del pico, teniéndose $\varphi = T_p - T_1$, $\delta = T_2 - T_p$ y $\omega = T_2 - T_1$.

De acuerdo a la forma de los picos, que representan los distintos procesos térmicamente estimulados, se han establecido diferentes clasificaciones, destacándose las referidas a picos de primer orden y segundo orden[6]. Esta clasificación se establece a partir de los valores de δ y φ . Para un pico de primer orden debe cumplirse que $0.7 \leq \delta/\varphi \leq 0.8$; mientras que para un pico de segundo orden debe cumplirse $1.05 \leq \delta/\varphi \leq 1.2$ [6].

El sistema que es objeto de estudio, como se verá más adelante, muestra un solo pico bien definido en el intervalo de temperatura de interés. A partir de la curva experimental se obtuvo para dicho pico el valor $\delta/\varphi = 0.8$, permitiendo clasificarlo como pico de primer orden. Luego, solo se abordará el método de la forma del pico para picos de primer orden. En este caso se trabajará con una expresión para el cálculo de la energía de activación en función de T_1 , T_p y φ para la primera mitad del pico.

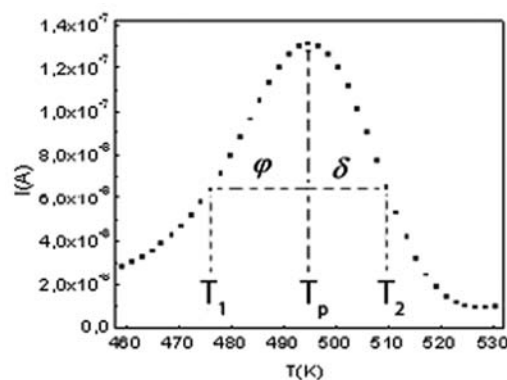


Figura 1: Ejemplo de una curva de corriente térmicamente estimulada. Se señalan los correspondientes parámetros de interés para el análisis mediante el método de la forma del pico.

Según Randall y Wilkins[8], la ecuación que describe las curvas de primer orden viene dada por la expresión:

$$I = -C \left(\frac{dn}{dt} \right) = C n s e^{-E_a / k_B T} \quad (2)$$

donde n es la concentración de electrones (cm^{-3}), t es el tiempo, s es el factor pre-exponencial (s^{-1}), C una constante geométrica, E_a es la energía de activación, T es la temperatura y k_B es la constante de Boltzmann.

La solución de esta ecuación diferencial, donde β representa la velocidad de calentamiento, es:

$$I = -C \left(\frac{dn}{dt} \right) \quad (3)$$

$$I = n_0 s e^{-E_a / k_B T} e^{\left[-\int_0^T \left(\frac{s}{\beta} \right) e^{-E_a / k_B T'} dT' \right]} \quad (4)$$

Evalutando la expresión (4) en T_1 y en T_p , y luego dividiéndolas entre sí, se obtiene:

$$\frac{1}{2} = e^{\left[\frac{-E_a}{k_B} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_p} \right) \right]} e^{\left[-\int_{T_1}^{T_p} \left(\frac{s}{\beta} \right) e^{-E_a / k_B T'} dT' \right]} \quad (5)$$

Integrando por partes y haciendo un desarrollo en el infinito de la exponencial integral se obtiene:

$$\int_{T_1}^{T_p} e^{-E_a / k_B T'} dT' = \left[T_p \frac{e^{-E_a / k_B T_p}}{E_a / k_B T_p} \right] - \left[T_1 \frac{e^{-E_a / k_B T_1}}{E_a / k_B T_1} \right] \quad (6)$$

Ha sido previamente reportado que $s/\beta > 10^7$ [8], lo cual permite asumir que:

$$\left(\frac{T_1}{T_p} \right)^2 \approx 1 \quad (7)$$

Luego, sustituyendo la condición de máximo obtenida de la ecuación (2), la ecuación (6) en la (5), y considerando además lo antes planteado en (7), se obtiene (8):

$$E_a = 1.51 k_B \frac{T_p T_1}{\varphi} \quad (8)$$

Esta expresión permite calcular el valor de la energía de activación considerando la primera parte del pico, a partir de los valores de T_1 , T_p y φ .

En el programa implementado en Mathematica se utilizó la función anteriormente creada en el método del ascenso inicial que separa los datos experimentales en intervalos donde solo se encuentre un pico. Se calculan los valores de T_1 , T_p y φ en cada intervalo previamente escogido, los cuales se utilizan en el cálculo de la energía de activación en cada caso.

PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

El sistema cerámico estudiado fue preparado mediante el método cerámico tradicional [5, 9] a partir de la composición nominal $\text{Pb}_{0.88}\text{Sm}_{0.08}\text{TiO}_3$. La mezcla y molida de los óxidos de partida de alta pureza fue realizada durante dos

horas en un molino de bolas. Posteriormente los polvos se prensaron y fueron calcinados a 900°C en atmósfera de aire por 2 horas. Se molieron nuevamente por una hora en un molino de bolas, se prensaron y finalmente se sinterizaron a 1220°C por 2 horas en un crisol de platino. Electrodo de plata fueron depositados en ambas caras del disco cerámico obtenido a través de un tratamiento térmico a 590°C .

Para la determinación de la dependencia I - T , las muestras fueron previamente calentadas hasta una temperatura superior a la temperatura correspondiente a la transición de fase ferroeléctrica-paraeléctrica y luego enfriadas bajo la acción de un campo eléctrico de 100 kV/cm (proceso de polarización). Posteriormente el campo eléctrico fue retirado y se cortocircuitó la muestra. Finalmente se inició nuevamente el calentamiento de la muestra y con ello la determinación de la corriente eléctrica para cada temperatura.

La velocidad de calentamiento empleada fue de 10°C/min , con un control estricto de este parámetro, y un error en la lectura de la temperatura de 2°C . La técnica experimental se concibió, además, para garantizar un calentamiento homogéneo de la muestra en estudio (11.44 mm de diámetro y 0.5 mm de espesor). A través de este procedimiento experimental controlado se obtuvieron datos experimentales confiables.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La Figura 2 muestra los valores experimentales obtenidos de I vs. T en un amplio intervalo de temperatura, que abarca desde la temperatura ambiente hasta temperaturas muy superiores a la temperatura de transición de fase ferroeléctrica-paraeléctrica ($T_m = 633 \text{ K}$). Como el objetivo es analizar el sistema en estado ferroeléctrico, se limitará el análisis de la curva experimental hasta la temperatura $T_m = 633 \text{ K}$, región mostrada en la Figura 3.

En la Figura 3 se muestra la dependencia de la corriente con la temperatura en el intervalo desde 300 K hasta la temperatura de transición ($T_m = 633 \text{ K}$). Se observa un primer pico entre 450 K y 530 K asociado a la respuesta piroeléctrica del material. Como se mencionó anteriormente, el comportamiento observado en este tipo de materiales se caracteriza por un incremento de la corriente hasta un valor máximo y su posterior decrecimiento hasta la temperatura de transición (T_m), donde debe anularse. En la Figura 3 se observa que este tipo de comportamiento no se manifiesta, evidenciándose un incremento de la corriente en el intervalo de 540 K hasta 633 K (T_m). Por otro lado, al llegar a la temperatura de transición la corriente no se anula, incrementándose para temperaturas superiores a T_m . Este hecho está dado por la activación de todos los procesos en el material con la temperatura, incluyendo los procesos conductivos, que pueden solaparse con la respuesta piroeléctrica del material en la dependencia I - T [5]. Luego, para este sistema se analizarán dos procesos: 1.- la contribución piroeléctrica (primer pico) y 2.- la contribución asociada a procesos conductivos (segundo ascenso de los valores de la corriente; temperaturas entre 540 y 633 K).

Para el cálculo de la energía de activación correspondiente al primer pico, se utilizó primeramente el método del ascenso inicial, obteniéndose un valor para la energía de activación de 0.23 eV. Por su parte, mediante el método de la forma del pico se obtuvo una energía de activación de 1.65 eV. Es evidente que ambos métodos ofrecen valores de energía de activación marcadamente diferentes, que no permiten evaluar adecuadamente el proceso en cuestión.

Es conocido que en este tipo de materiales, que muestran una estructura perovskita, la caída de la polarización espontánea (despolarización) está asociada al movimiento térmico del ion titanio en los sitios B de la estructura[5]. Para este proceso de despolarización se reportan valores de energía de activación del orden de 2 eV¹⁰. Como ya se discutió previamente, el primer pico observado para el sistema en cuestión no es más que la contribución piroeléctrica, la cual es el resultado del proceso de despolarización del material. Luego, la energía de activación para este proceso debe ser del orden de 2 eV. Sin embargo, se debe tener en cuenta que esta contribución no está aislada de la segunda contribución dada por el incremento abrupto de la corriente hasta temperaturas incluso superiores a T_m (Figuras 2 y 3). Dado este hecho, los valores de energía de activación pueden estar afectados por esta segunda contribución.

Partiendo de este análisis, se puede concluir que el método del ascenso inicial no ofrece un resultado adecuado para el análisis del proceso en cuestión, ya que ofrece un valor para la energía de activación muy inferior (aproximadamente un orden de magnitud) a lo que debería esperarse para este tipo de proceso. Por su parte, el método de la forma del pico ofrece un valor que está en el orden de lo que debía esperarse, por lo que ofrece un resultado confiable para el análisis del proceso. Es decir, la contribución piroeléctrica tiene una energía de activación de 1.65 eV.

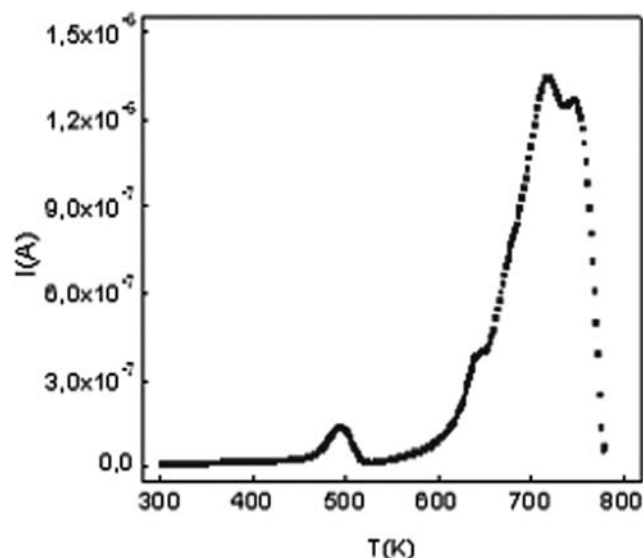


Figura 2. Dependencia de la corriente eléctrica con la temperatura para un amplio intervalo de temperaturas.

Analicemos ahora la segunda contribución, para ver como podría influir en el valor de la energía de activación de la contribución piroeléctrica. Esta segunda contribución, como ya se ha visto, está asociada a procesos conductivos. Como se trata de un intervalo de temperaturas, donde no se define un pico (Figura 3), solo se empleó el método del ascenso inicial. Se obtuvo un valor de energía de activación de 0.86 eV, el cual es del orden de lo reportado previamente para el movimiento de oxígeno mediante un mecanismo de vacancias, las que constituyen los defectos móviles más probables en las estructuras perovskitas [9].

En los sistemas basados en plomo, es conocida la fácil volatilización del PbO a elevadas temperaturas durante la calcinación de los polvos y la fase de sinterización, lo cual conduce a la formación de vacancias de oxígeno y plomo. Las vacancias de plomo requieren valores de energía superiores a 2 eV para ser activadas, mientras que las vacancias de oxígeno pueden activarse con valores de energía entre 0.6 y 1 eV, e incluso inferiores [9]. Luego, para estos sistemas los procesos conductivos estarán caracterizados por las vacancias de oxígeno. Así se puede concluir, que la segunda contribución en nuestro material está asociada a la movilidad de vacancias de oxígeno con una energía de activación de 0.86 eV.

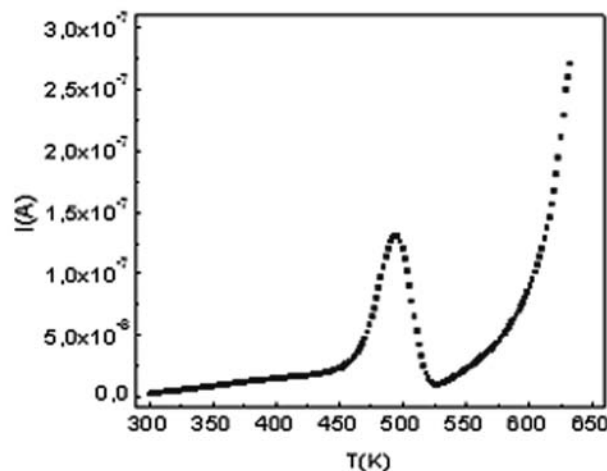


Figura 3. Dependencia de la corriente con la temperatura hasta la temperatura de transición $T_m = 633$ K.

Ahora, ¿cómo influyen estas vacancias en la contribución piroeléctrica?

Ya se ha discutido como la contribución piroeléctrica está afectada por la segunda contribución, dado que en lugar de continuar disminuyendo la corriente hasta anularse en la temperatura de transición T_m , se observa un incremento de esta en un amplio intervalo de temperaturas, indicado que el fenómeno piroeléctrico no es independiente, sino que está solapado con los procesos conductivos asociados a vacancias de oxígeno. Esta presencia de vacancias de oxígeno en la red puede deformar los dipolos debido a los iones de Ti^{4+} , provocando con ello que la energía necesaria para que ocurra el proceso de despolarización[9] del material sea inferior a la reportada para sistemas donde el proceso de despolarización no está afectado por fenómenos conductivos.

CONCLUSIONES

Se llevó a cabo el análisis de los dos procesos térmicamente estimulados observados en la cerámica ferroeléctrica $\text{Pb}_{0.88}\text{Sm}_{0.08}\text{TiO}_3$ hasta la temperatura correspondiente a la transición de fase ferroeléctrica-paraeléctrica. Se emplearon dos métodos para este análisis: el método del ascenso inicial y el método de la forma del pico. Para el cálculo se desarrollaron dos programas, empleando Mathematica, que permiten obtener la energía de activación de los diferentes procesos a partir de la dependencia experimental de la corriente eléctrica con la temperatura (corriente térmicamente estimulada).

El resultado para la energía de activación de la primera contribución fue de 1.65 eV, asociado con la respuesta piroeléctrica del material. Para la segunda contribución se obtuvo un valor de energía de activación de 0.86 eV. En este caso se asoció el proceso térmicamente estimulado al movimiento de oxígeno por un mecanismo de vacancias.

Los resultados preliminares de energía de activación han estado en correspondencia con los valores reportados en la literatura, lo cual permite decir que los métodos implementados son confiables para la obtención de los resultados. La continuidad de este trabajo incluirá el empleo de otros métodos para el análisis de las curvas experimentales I vs T , así como el estudio en otras muestras.

AGRADECIMIENTOS

Agradecimientos a la Academia de Ciencias del Tercer Mundo (TWAS) por los proyectos Research Grant: RG/PHYS/LA No. 99-050, No. 02-225 y No. 05-043, y al ICTP por el apoyo a la Red Latinoamericana de Materiales Ferroeléctricos. Gracias a Regina de Lahaye Torres por la preparación del sistema cerámico y al MSc. Yuriel Núñez por su orientación en los programas desarrollados. A. Peláiz-Barranco desea agradecer al Conseil Régional Languedoc-Roussillon por la invitación a la Universidad de Nîmes, Francia.

-
- [1] M. Tyunina, J. Levoska, Appl. Phys. Lett. 88, 262904 (2006).
 - [2] J. H. Ko, D. H. Kim, S. Kojima, Appl. Phys. Lett. 90, 112904 (2007).
 - [3] X. Zhao, W. Qu, H. He, N. Vittayakorn, X. Tan, J. Am. Ceram. Soc., 89, No. 1, 202 (2006).
 - [4] E. Suaste Gómez, Cerámicas Piezoeléctricas (Innovación Editorial Lagares, 2006).
 - [5] Y. Xu, Ferroelectric Materials and Their Applications (Elsevier Science Publishers B.V., The Netherlands, 1991).
 - [6] M. Venet Zambrano, Caracterización ferroeléctrica y estudios de corriente térmicamente estimulada en el sistema SBN modificado con lantano y titanio. Tesis de Diploma, Facultad de Física, Universidad de la Habana, Cuba (2000).
 - [7] R. Chen, G. A. Haber, Chem. Phys. Lett. 2, 483 (1968).
 - [8] L. I. Grossweiner, J. Appl. Phys. 24, 1306 (1953).
 - [9] A. Peláiz-Barranco, Y. Gonzalez Abreu, R. Lopez Noda, J. Phys. Condens. Matter 20, 505208 (2008).
 - [10] M. Maglione, M. Belkaoui, Phys. Rev. B 45, 2029 (1992).

EFEECTO DEL RUIDO INTRÍNSECO EN LA DINÁMICA DEL MÓDULO p53-Mdm2

L. CRUZ^a, N. FIGUEROA^{a†}, R. MULET^a Y J. PIÑERO^b

a) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba; infigueroa@fisica.uh.cu

b) Facultad de Biología, Universidad de La Habana, Cuba; janetpglz@gmail.com

† autor para la correspondencia

El estudio de la proteína p53 ha cobrado gran importancia en los últimos años debido a que se han apreciado mutaciones en ella en alrededor del 50% de los tumores observados en humanos. Estudios experimentales han evidenciado que células irradiadas inducen oscilaciones en las concentraciones de la p53 y su principal antagonista la proteína Mdm2, las cuales han motivado muchos modelos con el afán de explicar el mecanismo de estas oscilaciones así como su relevancia desde el punto de vista biológico. En este trabajo nos proponemos el estudio de un modelo que sea capaz de reproducir las oscilaciones. Para esto se hará una formulación estocástica del problema, a partir de la cual se obtendrán las ecuaciones deterministas que lo describen. Además emplearemos el algoritmo de Gillespie para simular el comportamiento del sistema y comparar con las predicciones deterministas y los gráficos experimentales reportados en la literatura.

The p53 protein plays a critical role in the prevention of cancer and it is inactivated in most of human cancers. Experimental studies show that stress conditions, like DNA damage, induce oscillations in the concentrations of the proteins p53 and in its main negative regulator, Mdm2. In this work we studied a model capable of reproducing these oscillations. We formulated the problem in a stochastic way and we obtained a deterministic system to describe this model. We used Gillespie's algorithm to simulate the behavior of the system, and to compare with the deterministic solution and with the experimental observations.

Palabras Clave. Noise fluctuation phenomena 05.40.Ca, Stochastic processes, 05.40.-a, Biological systems chemical kinetics in, 82.39.-k, 87.15.R-.

INTRODUCCIÓN

Los genes supresores de tumores juegan un importante papel en la regulación del crecimiento celular. Su mal funcionamiento puede provocar una proliferación anormal de la célula y el desarrollo de tumores. El p53 fue uno de los primeros genes supresores de tumores descubiertos. La proteína supresora p53 juega un importante papel en el desarrollo del cáncer y está inactiva en las células de casi todos los tumores malignos. Esta proteína es un factor de transcripción y se ha observado que aparece mutada en alrededor del 50% de los tumores observados en humanos [1].

Para entender las funciones de la proteína p53 es necesario estudiar el circuito que la regula. Una de las proteínas más importantes en este es la Mdm2. Ambas proteínas forman un circuito de autorregulación negativa, en el cual la p53 activada se une al gen que codifica la proteína Mdm2 y estimula la transcripción de este en un ARN mensajero (ARNm), a partir del cual se sintetiza la proteína. A su vez, la Mdm2 se une a la p53, inhibe su actividad como factor de transcripción y estimula su degradación [2].

En condiciones normales p53 se encuentra en concentraciones bajas en la célula. En presencia de señales de estrés tales como daño en el ADN su red se activa y aumenta su concentración en el medio celular, fundamentalmente por medio de mecanismos que inhiben su interacción con la Mdm2. Estudios ex-

perimentales, han evidenciado que las concentraciones de p53 y Mdm2 muestran un comportamiento oscilatorio, con cierto tiempo de retraso entre las oscilaciones de ambas proteínas, luego de que por ejemplo, la célula sea irradiada con rayos gamma [3], [4]. Mediciones realizadas por Naama Geva-Zatorsky y col. sobre 1000 células, mostraron grandes fluctuaciones en las amplitudes de las oscilaciones presentadas por distintas células e incluso entre los diferentes picos de las mismas células.

En este trabajo estudiaremos las oscilaciones de p53 y Mdm2 a partir de un modelo que describa las transformaciones individuales de cada proteína, considerando que la ocurrencia de una determinada reacción es un proceso aleatorio y con esta formulación reproduciremos uno de los modelos deterministas estudiados por Naama Geva-Zatorsky y col. Además recurriremos al algoritmo de Gillespie para estudiar la evolución del sistema considerando sus propiedades estocásticas y para observar las diferencias de los resultados que este arroja con respecto a las predicciones deterministas.

ESTUDIO ESTOCÁSTICO DEL SISTEMA P53-MDM2. MODELO DETERMINISTA.

Para entender el comportamiento de las proteínas p53 y Mdm2 es necesario estudiar la evolución de las concentraciones de ambas. La forma tradicional de enfrentar este problema es propo-

ner y resolver un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que describa la evolución temporal de las concentraciones de cada proteína. Sin embargo para que esta formulación sea válida se necesita que las concentraciones de ambas proteínas se puedan considerar como variables continuas. Esto es admisible cuando el número de moléculas es por ejemplo del orden de 10^{23} , lo cual constituye una buena aproximación de un sistema infinito en el cual tiene sentido considerar los valores medios de las concentraciones sin importar las fluctuaciones alrededor de estos. Sin embargo, cuando el número de moléculas es del orden de $10^3 - 10^4$, como ocurre con las cantidades celulares de p53 y Mdm2, entonces ya el sistema se hace discreto y la descripción determinista no es del todo correcta.

En este trabajo nos proponemos formular el problema planteando las transformaciones individuales de cada una de las especies consideradas con el objetivo de en primer lugar, reproducir las ecuaciones deterministas anteriores, y en segundo lugar realizar simulaciones estocásticas que permitan estudiar el sistema desde este punto de vista.

Consideraremos sólo tres especies en nuestra descripción: la proteína p53, la proteína Mdm2 y el ARN mensajero de mdm2, este último, elemento intermediario entre el p53 y el Mdm2. Identificar al ARN mensajero como al menos uno de los intermediarios entre el p53 y el Mdm2 parece evidente ya que la transcripción de un ARN mensajero es uno de los pasos obligatorios en la síntesis de las proteínas.

En las reacciones que se presentan a continuación aparece el gen que codifica la proteína Mdm2, pero no lo consideraremos en el posterior análisis del sistema, dado que su concentración no varía. En el modelo consideraremos las siguientes interacciones:

La p53, una vez que está activada (lo cual puede ocurrir por mecanismos que en este trabajo no consideraremos) actúa como factor de transcripción del gen que codifica la proteína Mdm2, formando un ARNm a partir del cual se sintetiza Mdm2, reacción que representaremos de la siguiente forma:



-Una vez formado el ARN mensajero (ARNm) ocurre la síntesis de la proteína:



-El ARNm se degrada con cierta velocidad:



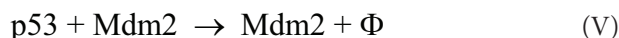
Donde por Φ entenderemos cualquier reaccionante distinto de los tres fundamentales que estamos considerando.

Otro elemento importante en este sistema es la síntesis de p53, la cual en este momento consideraremos que depende

directamente de la cantidad de p53 que hay en el sistema, ya que se conoce que p53 estimula la síntesis de proteínas que a su vez estimulan el aumento de las concentraciones de esta proteína activa [5]:



Como explicamos anteriormente Mdm2 es un regulador negativo de p53, en este modelo solo consideraremos que estimula la degradación de p53, la cual depende directamente de la cantidad de cada una de estas proteínas en el sistema:



-Además consideraremos la degradación de Mdm2:



El estado del sistema en cada instante dependerá de las cantidades de p53, Mdm2 y ARNm, lo cual denotaremos por un vector $\vec{n} = \{n_1, n_2, n_3\}$, donde n_1 es la cantidad de moléculas de p53, n_2 la cantidad de moléculas de Mdm2 y n_3 la cantidad de ARNm en el sistema en el instante t .

Consideraremos que cada una de estas reacciones es un proceso que puede ocurrir aleatoriamente en el tiempo. Luego definiremos la probabilidad de ocurrencia de cada reacción en la unidad de tiempo la cual denotaremos por $W_i(\vec{n})$, donde $i = \{1, \dots, 6\}$ y que depende del estado en que se encuentra el sistema, por tanto para cada reacción tendremos:

$$W_1 = k_1 n_1 \quad W_2 = k_2 n_3$$

$$W_3 = k_3 n_3 \quad W_4 = k_4 n_1$$

$$W_5 = k_5 n_1 n_2 \quad W_6 = k_6 n_2$$

Donde k_i es la constante de velocidad de cada reacción.

Definamos los vectores de transformación de los reaccionantes para cada reacción:

$$\vec{v}_1 = \{0, 0, 1\} \quad \vec{v}_2 = \{0, 1, 0\}$$

$$\vec{v}_3 = \{0, 0, -1\} \quad \vec{v}_4 = \{1, 0, 0\}$$

$$\vec{v}_5 = \{-1, 0, 0\} \quad \vec{v}_6 = \{0, -1, 0\}$$

Cada componente de $\vec{v}_i$ indica la transformación que sufre cada reaccionante en la reacción i -ésima

La evolución en el tiempo de la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado $\vec{n}$ en el instante t se describe a través de la ecuación maestra, esta dependerá de la probabilidad de que el sistema transite desde cualquier estado al estado $\vec{n}$ al ocurrir cualquiera de las reacciones anteriores y de que evolucione hacia otro estado si en el instante t se encontraba en el estado $\vec{n}$:

$$\frac{dP_{\vec{n}}(t)}{dt} = \sum_{i=1}^6 (W_i(\vec{n}-\vec{v}_i)P_{\vec{n}-\vec{v}_i}(t) - W_i(\vec{n})P_{\vec{n}}(t)) \quad (1)$$

Donde $W_i(\vec{n})P_{\vec{n}}(t)$ es la probabilidad por unidad de tiempo de que el sistema que se encuentra en el estado $\vec{n}$ en el instante t , transite hacia otro nuevo estado al ocurrir la reacción i -ésima y $W_i(\vec{n}-\vec{v}_i)P_{\vec{n}-\vec{v}_i}(t)$ es la probabilidad por unidad de tiempo de que el sistema que se encuentre en el estado $\vec{n}-\vec{v}_i$ en el instante t transite hacia el estado $\vec{n}$ al ocurrir la reacción i -ésima. Para obtener las ecuaciones de campo medio a partir de la ecuación maestra basta multiplicar ambos miembros por el vector $\vec{n}$ y sumar sobre todas las posibles configuraciones, luego de lo cual obtenemos:

$$\frac{d\langle \vec{n} \rangle}{dt} = \sum_{i=1}^6 \vec{v}_i \langle W_i(\vec{n}) \rangle \quad (2)$$

Si definimos el vector adimensional: $\vec{x}(t) = \langle \vec{n}(t) \rangle / N$ y las velocidades de transición también adimensionales en la forma:

$$a_i(\vec{x}) = \frac{W_i(\vec{n})}{N} = \frac{W_i(N\vec{x})}{N} \quad (3)$$

Entonces obtenemos la formulación determinista del problema:

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \sum_{i=1}^6 \vec{v}_i a_i(\vec{x}) \quad (4)$$

O en forma extendida para cada componente de x :

$$\frac{dx_1}{dt} = k_4 x_1 - k_5 x_1 x_2 \quad (5)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = k_2 x_3 - k_6 x_2 \quad (6)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = k_1 x_1 - k_3 x_3 \quad (7)$$

El sistema de ecuaciones (5), (6), (7) obtenido es análogo a uno de los sistemas propuestos por Naama Geva-Zatorsky y col. [3] el cual mostramos en (8), (9), (10).

$$\frac{dx}{dt} = \Gamma x - \alpha_{xy} xy \quad (8)$$

$$\frac{dy_o}{dt} = \beta_y x - \alpha_o y_o \quad (9)$$

$$\frac{dy}{dt} = \alpha_o y_o - \alpha_y y \quad (10)$$

La formulación anterior del problema nos permite extraer cierta información del mismo. En primer lugar se pueden obtener los puntos fijos y hacer a su vez un análisis de la estabilidad de estos.

Para hallar los puntos fijos se debe resolver el sistema de ecuaciones:

$$\frac{dx_1}{dt} = 0 \quad (11)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = 0 \quad (12)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = 0 \quad (13)$$

Esto lo podemos convertir en un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas despejando en (13) x_3 en función de x_1 :

$$f_1(x_1, x_2) = 0 = k_4 x_1 - k_5 x_1 x_2 \quad (14)$$

$$f_2(x_1, x_2) = 0 = k_2 \frac{k_1}{k_3} x_1 - k_6 x_2 \quad (15)$$

De modo que nos devuelve los siguientes valores para los puntos fijos, donde nos hemos quedado con la solución distinta de la trivial:

$$\{x_1^* = \frac{k_4 k_6 k_3}{k_1 k_2 k_5}, x_2^* = \frac{k_4}{k_5}, x_3^* = \frac{k_4 k_6}{k_2 k_5}\}$$

Para analizar la estabilidad basta escribir la matriz Jacobiana del sistema formado por (14) y (15) evaluada en los puntos fijos y hallar los autovalores de la misma:

$$\begin{pmatrix} -\lambda & -\frac{k_4 k_6 k_3}{k_1 k_2} \\ \frac{k_1 k_2}{k_3} & -k_6 - \lambda \end{pmatrix} \Rightarrow \lambda^2 + k_6 \lambda + k_8 k_4 = 0$$

Las soluciones de este sistema tendrán la forma:

$$\lambda_{1,2} = \frac{-k_6 \pm \sqrt{D}}{2}, \text{ cuyo discriminante es: } D = k_6^2 - 4k_6 k_4$$

La parte real de esta solución será siempre negativa ya que k_6 es una magnitud por definición positiva y la solución tendrá parte imaginaria distinta de cero en dependencia del valor del determinante.

Si, $D < 0$ y por tanto $k_6 < 4k_4$ entonces el punto fijo será oscilatorio y estable. De acuerdo a los resultados experimentales trabajaremos con los valores de los parámetros que reproducen el comportamiento oscilatorio.

El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias se puede resolver numéricamente escogiendo los valores de parámetros y condiciones iniciales reportados por Naama Geva-Zatorsky y col. El comportamiento del sistema se muestra en la Fig.1. Como se

puede apreciar la formulación determinista predice oscilaciones amortiguadas para p53 y Mdm2. En la figura se aprecia un retraso entre los picos de p53 y Mdm2, lo cual coincide con los resultados experimentales: ante la presencia de cierto daño en la célula que activa a p53, se aprecia un aumento en la concentración de la misma como un primer mecanismo para reparar el daño. Dado que el p53 es un factor de transcripción para el gen de mdm2, al aumentar su concentración se induce un incremento con cierto retraso de la concentración de la proteína Mdm2. A su vez, el aumento de Mdm2 favorece la degradación de p53, lo que disminuye su actividad como factor de transcripción lo que provoca una disminución de los niveles de Mdm2. Mientras persista el daño y p53 vuelva a aumentar su concentración, este ciclo permanecerá, aunque el modelo determinista muestra que las oscilaciones se amortiguarán con el tiempo. Las predicciones deterministas no reproducen todos los resultados experimentales. En estos se aprecian fluctuaciones en la amplitud de las oscilaciones que el modelo determinista no es capaz de reflejar.

SIMULACIÓN ESTOCÁSTICA

En la sección anterior obtuvimos a partir de la ecuación maestra la formulación determinista del circuito de p53 y Mdm2 considerando al ARN mensajero como intermediario entre las proteínas, pero el resultado obtenido no captura la variabilidad que presentan las células en la amplitud de los picos para las oscilaciones de p53 y Mdm2. En el estudio realizado por Naama Geva-Zatorsky y col. con el objetivo de reproducir las fluctuaciones observadas, modifican el sistema (8), (9) y (10) añadiendo un término de ruido aleatorio que multiplica a los términos de aumento de la concentración de p53 en las ecuaciones diferenciales (8) y (9), y considerando ruido de baja frecuencia logran reproducir las fluctuaciones en la amplitud de las oscilaciones observadas experimentalmente.

Nosotros en este trabajo hemos enfrentado el problema a partir de una formulación estocástica. En general la solución exacta de la ecuación maestra nos permitiría obtener todas las propiedades del sistema, pero esta solo es soluble cuando las probabilidades de transición son constantes o lineales. Esta característica de la ecuación maestra conlleva a que muchas veces se recurra a algoritmos computacionales para estudiar la evolución en el tiempo del sistema.

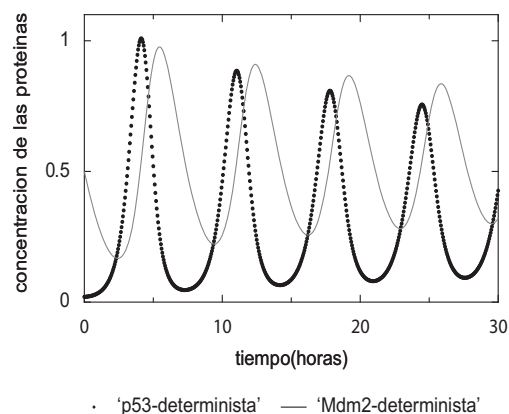


Figura 1: Solución numérica del sistema de ecuaciones $k_2=k_3=1.1\text{ h}^{-1}$, $k_4=2\text{ h}^{-1}$, $k_5=3.7\text{ h}^{-1}$, $k_6=0.9\text{ h}^{-1}$, con condiciones iniciales: $x_1=0.02$, $x_2=0.5$, $x_3=0.2$

En este trabajo emplearemos el Algoritmo de Gillespie [6] como herramienta para apreciar la evolución del sistema estocástico. Los parámetros empleados en las simulaciones determinista y estocástica se escogieron de forma tal que satisfagan las condiciones para observar oscilaciones estables, según el análisis de estabilidad realizado anteriormente. En la Fig.2 se muestran los resultados del Algoritmo de Gillespie para el sistema que estamos estudiando con el mismo conjunto de parámetros y de condiciones iniciales que se emplearon para obtener la solución del sistema de ecuaciones diferenciales deterministas.

La simulación, como se puede apreciar devuelve oscilaciones no amortiguadas, que presentan gran variabilidad en las amplitudes de los diferentes picos, según muestra la Fig.2 y por tanto recoge la esencia de las oscilaciones observadas por Naama Geva-Zatorsky y col. Esto permite afirmar que las variaciones en la amplitud de las oscilaciones observadas experimentalmente se deben a las fluctuaciones propias del sistema. Este, siendo esencialmente finito, es un sistema en el cual pequeños cambios en las cantidades de cada proteína pueden ser significativos con respecto a los valores medios. Esto demuestra que no es necesario incluir factores de ruido multiplicativo a la velocidad de producción de las proteínas [3] para aproximarse a reproducir los resultados experimentales.

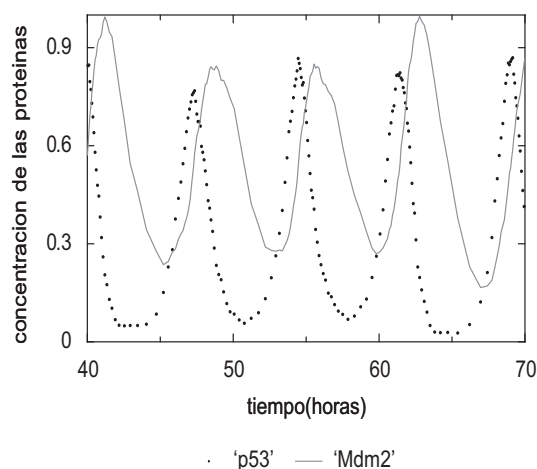


Figura 2: Oscilaciones obtenidas para las concentraciones de las proteínas p53 y Mdm2 empleando el algoritmo de Gillespie.

CONCLUSIONES

En sistemas de pocas partículas la formulación determinista que plantea la evolución en el tiempo de los valores medios no reproduce el comportamiento real del sistema, ya que en este caso las fluctuaciones con respecto a los valores medios pueden ser importantes y cambiar la dinámica del sistema. Tal es el caso del modelo presentado en este trabajo, en el cual el análisis determinista predice oscilaciones amortiguadas y es la simulación estocástica la que captura las fluctuaciones en la amplitud de las oscilaciones. Con el estudio aquí realizado pudimos comprobar que las fluctuaciones en el número de proteína p53 en una célula es una cualidad intrínseca del sistema que es finito y en el cual las reacciones ocurren aleatoriamente, cambiando las cantidades de proteínas, de forma que las amplitudes fluctúen tal y como predice el experimento y que por tanto no es necesario añadir términos de ruido

que indiquen variabilidad en la producción de la proteína, ni en ningún otro término del sistema determinista.

-
- [1] R. Lev Bar-Or, R. Maya, L.A. Segel, U. Alon, A.J. Levine and M. Oren, "Generation of oscillations by the p53-mdm2 Feedback loop: A theoretical and experimental study", PNAS 97: 11250-11255 (2000).
- [2] B. Volgestein , D.Lane and A.J. Levine, "Surfing the P53 network", Nature 408: 307-310 (2000).
- [3] N. Geva-Zatorsky, N. Rosenfeld, S. Itzkovitz, R. Milo, A. Sigal, E. Dekel,

T. Yarnitzky and U. Alon, "Oscillations and variability in the p53 system", Molecular Systems Biology, 2: 2006.0033 (2006).

[4] G. Lavah, N. Rosenfeld, A. Sigal, N. Geva-Zatorsky, A.J. Levine, M.B. Elowitz and U. Alon, "Dynamics of the p53-Mdm2 feedback loop in individual cells", Nature Genetics 36:147-150 (2004).

[5] S.L. Harris, A.J. Levine, "The p53 pathway: positive and negative feedback loops", Oncogene 24: 2899-2908 (2005).

[6] Daniel T. Gillespie "Exact Stochastic of Coupled Chemical Reactions"(1977).

DINÁMICA MOLECULAR CON TRANSICIONES CUÁNTICAS EN EL SISTEMA ArXeHg

ROLANDO LOZADA GARCÍA † Y GERMÁN ROJAS-LORENZO

Departamento de Matemática y Computación
Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas
Ave. Salvador Allende esq. Luaces. Plaza. La Habana. Cuba; roly@instec.cu
† autor para la correspondencia

Durante la fotoexcitación de mercurio atómico, a un estado electrónico (3P_1), en matrices sólidas mixtas de Ar y Xe se observa la formación de complejos moleculares diatómicos y triatómicos, durante la fotoexcitación. El estudio se realiza por medio de la técnica de Dinámica Molecular con Transiciones Cuánticas. Las superficies de energía potencial fueron construidas por medio del método de Estructuras Diatómicas en Moléculas. Los resultados permitieron correlacionar las diferentes señales registradas en los datos espectroscópicos experimentales con los diferentes complejos moleculares que se observan en las simulaciones durante la fotoexcitación de la impureza.

Formation of diatomic and triatomic exciplexes upon photoexcitation of atomic mercury to its 3P_1 electronic state in mixed Ar/Xe matrices is observed. The simulations were carried out using the Molecular Dynamics with Quantum Transition method. The Potential Energy Surfaces were built in the framework of the Diatomic in Molecule approximation. The different experimental spectroscopic bands were assignment to the different molecular complexes.

Palabras Clave. dinámica molecular 31.15.xv, estado electrónico excitado 31.50.Df.

INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas el estudio de los procesos fotoinducidos en los sistemas moleculares en fase condensada ha despertado el interés en la comunidad científica [1-17]. La fotodisociación, la isomerización, y el confinamiento y relajación de energía son algunos de los procesos de mayor interés. El conocimiento de los mecanismos básicos presentes en ellos no solo enriquece nuestra visión de la naturaleza, sino que ha permitido desarrollar innumerables aplicaciones tecnológicas, entre las que resaltan la obtención de energía solar, la optoelectrónica, la fototerapia, el uso de combustibles sólidos, y la generación de energía a partir de la fusión [18-21].

En todos los casos, las propiedades de un centro activo (solute) son afectadas por su entorno (solvente) dificultando el entendimiento de los procesos fotoinducidos a escala microscópica. Estas complicaciones pueden ser salvadas parcialmente con la técnica de aislamiento matricial [22-23], en la cual se confinan impurezas atómicas o moleculares en matrices sólidas de gases nobles. Los sólidos de gases nobles son empleados como sistemas modelos porque en ellos las interacciones soluto-solvente se minimizan permitiendo analizar los efectos del medio. Estos sólidos presentan estructuras estables y bien ordenadas, y pueden ser dopados con moléculas pequeñas y bien caracterizadas en fase gaseosa [1-8].

El estudio del mercurio atómico como soluto, utilizando la técnica de aislamiento matricial, permite explorar los efectos del

solvente sobre la dinámica de los orbitales electrónicos [24-25]. La importancia de estudiar este elemento está en que el mismo tiene múltiples usos, que abarcan la producción de pesticidas, las amalgamas dentales, pinturas, baterías, catalizadores, y equipos de laboratorios como termómetros, barómetros y otros instrumentos. Por otra parte, es un elemento que tiene interés biológico y para el medio ambiente, pues es tóxico para la salud y es un contaminante del aire y el agua [26].

En este trabajo se presenta un estudio acerca de la fotoexcitación del mercurio embebido en matrices sólidas de gases nobles, a un estado electrónico 3P_1 . El interés por este estado electrónico en particular se debe a que es un estado degenerado para el átomo de mercurio, pero esta degeneración se rompe con la presencia de un átomo de gas noble. Bajo estas condiciones la aproximación adiabática falla en la descripción del sistema, pues no se pueden desprestigiar los términos no adiabáticos de acoplamiento entre las ecuaciones electrónica y vibracional. Este rompimiento de la degeneración del estado 3P_1 ha sido observado experimentalmente. Para el complejo Hg-gas noble en estado gaseoso se han observado dos bandas de absorción, una correspondiente al estado $\Omega=0$ y la otra a los estados $\Omega=\pm 1$, donde Ω es la proyección del momento angular total J.

Además, la interacción entre el mercurio en el estado (3P_1) y los átomos de gases nobles no es isotrópica puesto que los orbitales

P no tienen simetría esférica.

Las investigaciones sobre los cristales de gases nobles puros y dopados se han realizado por medio de técnicas experimentales novedosas, entre las que se encuentran las espectroscopias de estados estacionarios y de resolución temporal en femtosegundos[12-16], y por métodos teóricos –analíticos y numéricos–, como la dinámica molecular[27-29]. Sin embargo, la mayoría de los estudios teóricos en estos sistemas se han dirigido a los aspectos energéticos del proceso de confinamiento y relajación de la energía, y no a los aspectos dinámicos que se reflejan en la respuesta del solvente. Existen trabajos previos sobre la dinámica de relajación presente en las matrices de gases nobles puras dopadas con átomos de mercurio[30-33].

Hasta donde conocemos, no existen estudios teóricos sobre la dinámica de relajación que acontece en los cristales de una mezcla de argón con xenón dopados con mercurio, cuando dicha impureza es fotoexcitada. Hacemos el estudio de estos procesos en dicho sistema, aplicando los métodos de Dinámica Molecular con Transiciones Cuánticas y el de Estructuras Diatómicas en Moléculas (DIM), por sus siglas en inglés.

MATERIALES Y MÉTODOS

Dinámica Molecular con Transiciones Cuánticas: Con esta metodología el problema electrónico es resuelto cuánticamente para determinar los elementos de la matriz de densidad electrónica, mientras que el problema nuclear es tratado clásicamente.

Con la selección de cualquier conjunto ortonormal de funciones de bases electrónicas $\phi_j(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ que dependan paramétricamente de las posiciones atómicas, se pueden definir los elementos matriciales del Hamiltoniano electrónico a través de la expresión:

$$V_{ij}(\mathbf{R}) = \langle \phi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}) | \hat{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{R}) | \phi_j(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \rangle, \quad (1)$$

donde los brackets representan la integración solo sobre las coordenadas electrónicas. De una forma similar se define el vector de acoplamiento no adiabático d_{ij} como:

$$d_{ij}(\mathbf{R}) = \langle \phi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \phi_j(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \rangle, \quad (2)$$

donde el gradiente opera sobre las coordenadas atómicas $\mathbf{R}$.

Si asumimos que el movimiento atómico puede ser descrito a través de cierta trayectoria, no determinada aun, $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$, donde t es el tiempo, el Hamiltoniano electrónico $\hat{H}_0(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ será un operador dependiente del tiempo a través de $\mathbf{R}(t)$.

La función de onda que describe el estado electrónico en el instante t , $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t)$, se puede expresar en términos de las funciones de bases electrónicas,

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) = \sum_j c_j(t) \phi_j(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (3)$$

donde las $c_j(t)$ son los coeficientes del desarrollo.

Al sustituir la expresión (3) en la ecuación de Schrödinger electrónica dependiente del tiempo, multiplicarla por la izquierda por $\phi_k^*(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ e integrarla por las $\mathbf{r}$, se llega a

$$i\hbar \dot{c}_k(t) = \sum_j c_j(t) [V_{kj}(\mathbf{R}) - i\hbar \dot{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{d}_{kj}(\mathbf{R})]. \quad (4)$$

La ecuación (4) es el resultado del método clásico estándar de “mejor trayectoria”. Para cualquier trayectoria que se considere $\mathbf{R}(t)$, el conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas que se muestran en (4) pueden ser integradas numéricamente para obtener las amplitudes $c_j(t)$ de cada estado electrónico. Debe notarse que hay dos términos que promueven las transiciones entre estados electrónicos, los elementos no diagonales del Hamiltoniano electrónico V_{kj} y el acoplamiento no adiabático $\dot{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{d}_{kj}$. Los términos V_{kj} desaparecen si las funciones de base electrónica fueron definidas en la representación adiabática.

La ecuación (4) se puede presentar en términos de los elementos de la matriz de densidad electrónica, los cuales se obtienen de:

$$a_{kj} = c_k c_j^* \quad (5)$$

Los elementos diagonales a_{jj} representan las poblaciones de los estados electrónicos.

Cada trayectoria $\mathbf{R}(t)$ se mueve por una sola superficie de energía potencial, y este proceso es interrumpido solo por la probabilidad de ocurrencia de saltos súbitos de un estado a otro en intervalos de tiempo infinitesimales.

Superficies de energía potencial: En el sistema compuesto por un átomo de mercurio embebido en una matriz de una mezcla de argón con xenón se trataron siete tipos de interacciones: Ar-Ar, Xe-Xe, Ar-Xe, Ar-Hg (6^1S_0), Ar-Hg (6^3P_1), Xe-Hg (6^1S_0), Xe-Hg (6^3P_1).

Estudios realizados en fase gaseosa de las estructuras diatómicas Hg-Ar y Hg-Xe arrojaron dos señales en la región de excitación cercana a la transición electrónica $^3P_1 \leftarrow ^1S_0$ del átomo de mercurio[34-37]. Una de las bandas aparece desplazada hacia el rojo con respecto a la línea espectral del mercurio, mientras que la otra banda aparece desplazada hacia el azul. La banda corrida hacia el rojo se asoció con el estado electrónico A de la molécula diatómica, mientras que la señal desplazada hacia el azul se relacionó con el estado electrónico B del complejo. Estas bandas están correlacionadas con la transición al estado excitado electrónico Hg(3P_1), pero para la A la proyección del momento angular electrónico del mercurio sobre el eje interatómico es $\Omega=0$, a diferencia de la B donde $\Omega=\pm 1$. Se empleó la representación acoplada $\mathbf{J}, \Omega$ porque la estructura diatómica satisface el caso c) de Hund. En nuestro trabajo los potenciales de interacción se

representaron a través de funciones de Morse. Los parámetros de todos los potenciales de interacción por pares utilizados en la caracterización del sistema Hg-Rg₄₉₉ se presentan en la tabla I.

Cuando el mercurio está en su estado básico, se construye una superficie de energía potencial considerando las interacciones del sistema aditivas por pares.

Método DIM: Dado que el átomo de mercurio en el estado 6^3P_1 posee un momento angular electrónico diferente de cero, las interacciones Rg-Hg (6^3P_1) no son aditivas por pares. Lo contrario implicaría en el sólido definir simultáneamente tantos ejes de cuantificación como pares Rg-Hg estén presentes en el sistema. La superficie de energía potencial se construyó utilizando el método semiempírico (DIM) desarrollado por Ellison[43-44], para calcular las superficies de energía potencial del estado básico y de los estados excitados de sistemas poliatómicos, a partir de los potenciales de estructuras diatómicas.

En el problema que nos ocupa, encontramos $N-1$ estructuras diatómicas Rg-Hg, siendo N el número total de átomos del cristal. Para cada uno de los pares (Rg-Hg)_k, ($k=1, \dots, N-1$), los potenciales V_A y V_B están definidos con respecto a un sistema de coordenadas (X_k, Y_k, Z_k) fijo en la estructura diatómica k , de manera que el eje de cuantificación Z_k coincide con la dirección internuclear. En esta representación el Hamiltoniano de interacción se considera electrostático puro y queda como,

$$H_{int}^{(Rg-Hg)_k} = \begin{bmatrix} V_B & 0 & 0 \\ 0 & V_B & 0 \\ 0 & 0 & V_A \end{bmatrix} \quad (6)$$

A través de una operación de rotación definimos a las matrices de potencial de las $N-1$ estructuras diatómicas del sólido con respecto a un sistema de referencias arbitrario (X', Y', Z') fijo en el laboratorio,

$$D H_{int}^{(Rg-Hg)_k} D^{-1}, \quad (7)$$

donde D es la matriz de rotación cartesiana:

$$D = \begin{bmatrix} \sin(\alpha) & 0 & \cos(\alpha) \\ -\cos(\beta) \cos(\alpha) & \sin(\beta) & \cos(\beta) \sin(\alpha) \\ -\sin(\beta) \cos(\alpha) & -\cos(\beta) & \sin(\beta) \sin(\alpha) \end{bmatrix} \quad (8)$$

para la cual, α es el ángulo comprendido entre la dirección internuclear (Rg-Hg)_k y el eje X' , y β es el ángulo formado entre la proyección de la dirección (Rg-Hg)_k sobre el plano $Y'Z'$ y el eje Y' .

Con una segunda operación de rotación similar a (7) expresamos las matrices de interacción con respecto a un sistema de referencias arbitrario (X, Y, Z) fijo en la matriz. Por conveniencia se hizo coincidir la dirección Z con la dirección internuclear de una de las estructuras diatómicas (Rg-Hg)_k. Es decir,

una dirección en la que se encuentran el átomo de mercurio y uno de los átomos de la matriz. En nuestro caso se seleccionó a uno de los átomos de la primera capa de vecinos.

Producto de las transformaciones de rotación, las matrices de interacción de cada par (Rg-Hg)_k presentan elementos no diagonales distintos de cero, lo que manifiesta una mezcla de los estados A y B en el cristal. La suma de las matrices de interacción de cada estructura diatómica más las contribuciones Rg-Rg nos da la matriz de interacción del sistema,

$$H_o = \sum_{k=1}^{N-1} H_{int}^{(Rg-Hg)_k} + \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^{N-1} V_{ij}^{Rg-Rg}, \quad (9)$$

cuyos elementos diagonales constituyen las superficies de energía potencial diabáticas del sólido.

Tabla I Parámetros de los potenciales utilizados para estudiar las interacciones Hg-Rg y Rg-Rg (Rg = Ar, Xe).			
Morse	D_o (cm ⁻¹)	R_o (Å)	α (Å ⁻¹)
Ar-Hg(X) ^a	130.25	3.98	1.45
Ar-Hg(A) ^a	353.63	3.34	1.54
Ar-Hg(B) ^a	51.57	4.66	1.12
Xe-Hg(X) ^b	254.00	4.25	1.23
Xe-Hg(A) ^b	1380.00	3.15	1.58
Xe-Hg(B) ^b	182.00	4.47	0.77
LJ (6-12)	ϵ (cm ⁻¹)	σ (Å)	
Ar-Ar ^{c,d}	13.48	6.41	
Xe-Xe ^{c,d}	23.68	7.52	
Xe-Ar ^{c,d}	20.03	6.90	

^{a)} Referencia [40]; ^{b)} M. Okunishi, H. Nakazawa, K. Yamanouchi, and S. Tsuchija, *J. Chem. Phys.* **93** (1990) 7526; ^{c)} Ch. Kittel, en *Introduction to solid state physics*, 5th edition (Wiley, New York, 1976); ^{d)} *Rare Gas Solids*, editors M. L. Klein and V. A. Venables (Academic Press, New York, 1977).

La diagonalización de H_o nos proporciona las superficies de energía potencial adiabáticas en las coordenadas nucleares. Cuando la matriz del Hamiltoniano de interacción presenta elementos no diagonales diferentes de cero, manifestando un acoplamiento o mezcla entre los estados, decimos que las superficies de energía potencial involucradas son diabáticas, mientras que el término adiabático lo reservamos para aquellas superficies que se describan a partir de una matriz del Hamiltoniano de interacción diagonal.

Esta metodología, que ha sido empleada con éxito en otros trabajos[11, 38, 39-42], nos proporciona tres superficies de energía potencial, tanto en la representación diabática, como adiabática, para describir al sistema cuando el átomo de mercurio está en el estado excitado 6^3P_1 .

Dinámica molecular del sólido Hg-Rg₄₉₉: En el cristal de argón dopado con xenón y mercurio, las simulaciones se realizaron en una supercelda computacional cúbica. En la construcción de la celda nos interesó el número n de átomos de xenón en la primera capa de vecinos siguiendo la notación $HgXe_nAr_{12-n}$. Sea $P(n)$ la probabilidad de encontrar n átomos de xenón en dicha capa, entonces $P(0) = 0.54$, $P(1) = 0.34$, $P(n \geq 2) \cong 0.24$. Las simulaciones se realizaron con estos tres tipos de casos.

Para $n = 0$ la celda está compuesta por 499 átomos de argón y un átomo de mercurio colocado en un sitio substitucional de la red.

Para $n = 1$ la celda está compuesta por 498 átomos de argón, 1 átomo de xenón y un átomo de mercurio colocados en sitios substitucionales. La posición del átomo de xenón en la primera capa de vecinos respecto al Hg no fue arbitraria. Dada la simetría de las posiciones de los átomos de esta capa se definieron tres posiciones representativas; colocar el átomo de xenón en el eje de cuantificación, colocar el átomo de xenón en el eje perpendicular al eje de cuantificación, y colocarlo en cualquiera de las posiciones restantes.

Para $n = 2$ la matriz está compuesta por 497 átomos de argón, 2 átomos de xenón y un átomo de mercurio colocados en los sitios substitucionales. Las posiciones de los dos átomos de xenón en la primera capa de vecinos al mercurio se tomaron a partir de las configuraciones estudiadas para un xenón. Así se construyeron 10 casos.

Solo se consideraron aquellas configuraciones en las que el ángulo formado entre un xenón, el mercurio y el otro xenón era mayor o igual a 90 grados. Las configuraciones que no cumplieron este requisito, ángulo menor de 90 grados, resultaron ser inestables en la simulación, ocasionando la ruptura de la estructura cristalina de la matriz en todos los casos.

Para todas las configuraciones estables se propagaron trayectorias de 20 ps en el estado fundamental y 100 trayectorias de 10 ps en cada uno de los niveles excitados.

Las dimensiones de la celda computacional empleada se estimaron para que el volumen corresponda adecuadamente con la densidad de la matriz, lo que condujo a una longitud para sus lados de 26.55 Å. Se aplicaron las condiciones periódicas de frontera. En la simulación se utilizó el radio de corte igual a la mitad de la longitud de un lado de la celda computacional, y se aplicó una función de error para corregir la discontinuidad del potencial. Las velocidades iniciales se asignaron de acuerdo a la distribución de Boltzmann, respetando que el momento total del sistema fuese igual a cero, y que la temperatura tomara el valor efectivo de 49 K. El sistema fue termalizado con un algoritmo de reescalamiento de velocidades[45] en una trayectoria de 20 ps. Dicha trayectoria evolucionó sobre una superficie de energía potencial que describe al cristal con la impureza

en su estado básico. El paso de integración se tomó igual a 1.0 fs, y a la constante de relajación temporal se le asignó el valor estándar usado en la literatura[11,45-46] de 0.4 ps. A continuación fue simulada otra trayectoria de 20 ps sobre la misma superficie de energía potencial, a partir de la última configuración del cristal guardada en la trayectoria anterior, para comprobar que el sistema está en equilibrio. En esta trayectoria se calculó la energía absorbida por el cristal en cada iteración, y se seleccionaron cien configuraciones distintas del sólido. Las cien configuraciones fueron escogidas en diferentes momentos de la dinámica a intervalos de tiempo suficientemente grandes que garanticen que la función de autocorrelación de las posiciones del átomo de Hg sea cero.

Estas configuraciones representan las condiciones iniciales para las simulaciones en los tres niveles adiabáticos del estado excitado. A continuación se calcularon cien trayectorias, a partir de las configuraciones seleccionadas, comenzando todas, su evolución sobre la superficie de energía potencial del sistema con el átomo de mercurio excitado en su estado adiabático 1. Otro tanto se realizó comenzando la evolución sobre la superficie de energía potencial adiabática 2, y también sobre la superficie de energía potencial adiabática 3.

En cada una de estas trescientas trayectorias se guardaron las posiciones y velocidades de los átomos, así como otras magnitudes de interés como la temperatura del sistema, la distancia de las primeras cuatro capas de vecinos, los acoplamientos diabáticos y adiabáticos, etc.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Niveles adiabáticos: Del análisis de la evolución de los acoplamientos, entre los estados electrónicos involucrados en el problema, se obtuvieron resultados semejantes a los reportados en el estudio de la fotoexcitación del mercurio atómico en matrices puras de gases nobles[30,31]. En resumen, los acoplamientos entre los estados diabáticos crecen al inicio de la dinámica y se mantienen altos durante el resto de la dinámica. Esto provoca que las poblaciones de los estados diabáticos se mantengan alrededor del 33 % durante toda la simulación. El comportamiento de los acoplamientos adiabáticos es diferente. El acoplamiento entre los niveles 2 y 3 predomina durante toda la dinámica, los acoplamientos entre los niveles 1 y 2, y los niveles 1 y 3 son importantes solamente en los primeros picosegundos después de la excitación. Esta característica de la evolución es la responsable de la transferencia de toda la población hacia el nivel adiabático 1, que es el de menor energía. Lo interesante es que estos comportamientos son independientes del valor de n . Las magnitudes que son afectadas por el número de Xe en la primera capa de solvatación son la fortaleza de los acoplamientos, los tiempos de decaimiento de los mismos, y los tiempos necesarios para que el nivel adiabático 1 se pueble al 100 %. Estas magnitudes, en todos los casos estudiados, aumentan con el aumento del valor de n , excepto la fortaleza de los acoplamientos, la

cual disminuye. Una estimación de los tiempos de decaimiento para el acoplamiento d_{1-2} , a través del ajuste de una función monoexponencial a la data obtenida, proporcionó valores de 0.17 ps, 0.38 ps y 0.58 ps cuando n es cero, uno y dos respectivamente. Mientras que los tiempos necesarios para que el nivel adiabático 1 se pueble al cien por ciento son 0.5 ps, 1.0 ps y 2.0 ps, en ese mismo orden.

Debemos resaltar cómo la presencia de átomos de Xenón en la primera capa de vecinos del mercurio modifica el comportamiento temporal del sistema. En la medida en que más átomos de xenón se incorporen a esta capa más lento es el proceso de migración de las poblaciones de los niveles involucrados hacia el nivel 1. La adición de átomos de xenón provoca cambios en la simetría espacial entorno al mercurio. Estos cambios originan modificaciones en la fortaleza de los acoplamientos adiabáticos disminuyendo su intensidad.

Bandas de absorción y emisión: Al realizar los cálculos de las bandas de absorción y emisión, estos presentan una buena correspondencia con los resultados experimentales (ver figuras 1 y 2). La banda de absorción está compuesta por la contribución de tres configuraciones de los complejos formados ($n = 0$, $n = 1$ y $n = 2$) dadas por el número de átomos de Xe en la primera capa de vecinos. Esta fue construida teniendo en cuenta la probabilidad $P(n)$ de encontrar estas configuraciones en el experimento. Podemos concluir que para las configuraciones $n = 0$ y $n = 1$ tenemos bandas absorción con estructura de tripletes que contribuyen significativamente a la banda de absorción del sistema. El aporte a la banda de absorción de las configuraciones obtenidas con $n = 2$, se manifiesta en un ensanchamiento de la banda.

En el experimento no se hace esta clasificación de los aportes de las diferentes configuraciones a la banda de absorción. Solo se menciona de forma intuitiva que el ancho de la banda es producido por el número de átomos de Xe y Ar en la primera capa de vecinos[24].

De la evolución de las poblaciones, era de esperar una estructura de singlete en la banda de emisión para cada una de las configuraciones ($n = 0$, $n = 1$ y $n = 2$). Este comportamiento se observa para $n = 0$ y $n = 1$, en correspondencia con el experimento, pero no para $n = 2$.

La banda de emisión obtenida para $n = 2$ presenta dos picos relacionados con la formación de los complejos $[Xe-Hg-Ar]^*$ y $[Xe-Hg-Xe]^*$. El pico de menor intensidad está en la zona de la banda obtenida para $n = 1$.

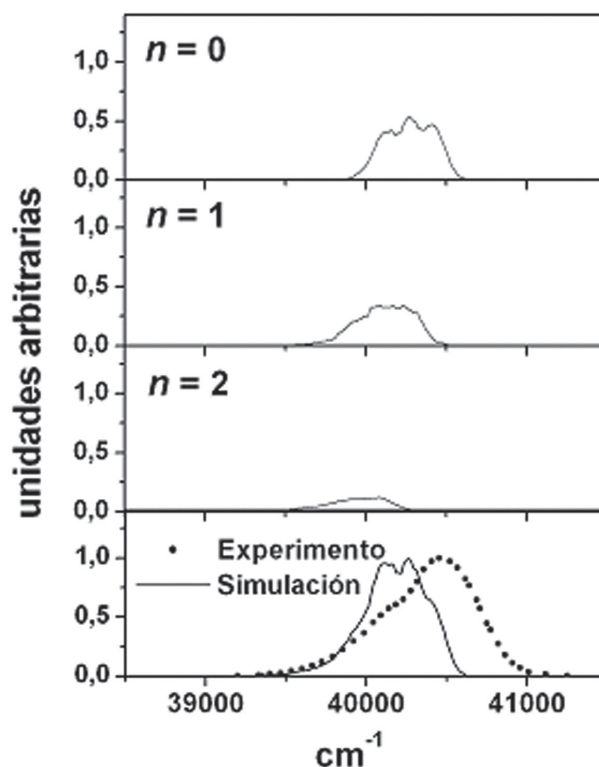


Fig. 1: Bandas de absorción para el sistema Hg-Rg. Las contribuciones de los diferentes complejos se señalan con los valores de n . Con círculos negros se representan los datos experimentales[24].

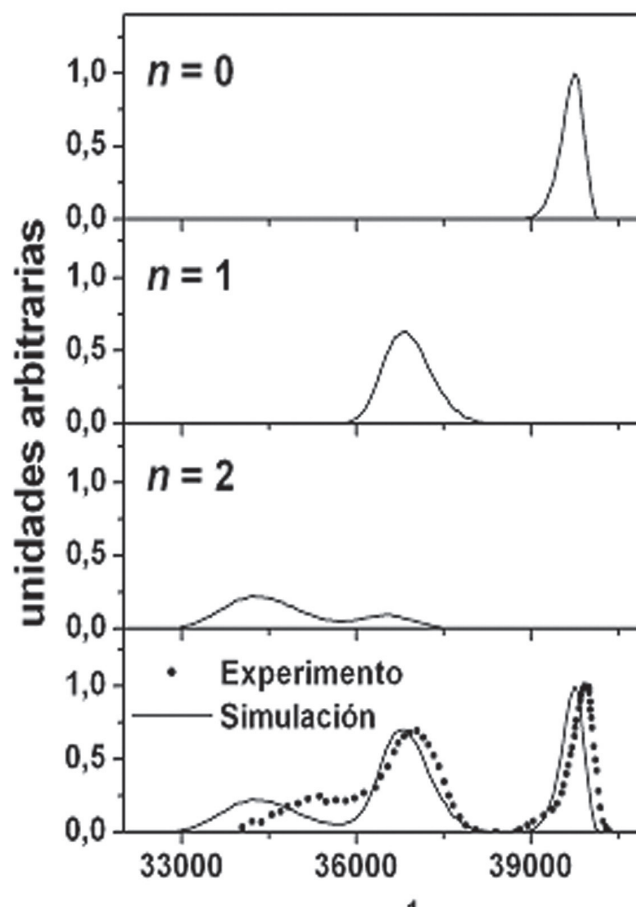


Fig. 2: Bandas de emisión para el sistema Hg-Rg. Las contribuciones de los diferentes complejos se señalan con los valores de n . Con círculos negros se representan los datos experimentales[24].

Formación de complejos moleculares: La estructura de las bandas de emisión se puede asociar a la formación de dos complejos moleculares. En la figura 2 vemos que la emisión tiene tres picos[24]. Para la configuración $n = 0$ obtenemos la emisión del mercurio aislado en una matriz de argón, lo cual corresponde con lo predicho en el experimento. Para los casos en que tenemos un átomo de xenón en la primera capa de vecinos, durante la dinámica posterior a la fotoexcitación se forma el complejo molecular $[\text{Xe-Hg}(^3\text{P}_1)\text{-Ar}]^*$, en lugar del complejo esperado $[\text{Xe-Hg}(^3\text{P}_1)]$. Todos estos complejos son lineales. En el caso de las configuraciones con dos átomos de xenón en la primera capa para las distribuciones con el ángulo Xe-Hg-Xe mayores de 90° y cercanos a 180° se forma el complejo molecular triatómico $[\text{Xe-Hg}(^3\text{P}_1)\text{-Xe}]^*$. Para las configuraciones en las que este ángulo es cercano a 90° se pueden formar en el tiempo los dos complejos moleculares $[\text{Xe-Hg}(^3\text{P}_1)\text{-Ar}]^*$ y $[\text{Xe-Hg}(^3\text{P}_1)\text{-Xe}]^*$.

En el cálculo de las bandas de absorción y emisión, las contribuciones de los diferentes complejos formados, fueron pesadas de acuerdo a las probabilidades de encontrar un átomo de Xe en la primera capa de vecinos. No se realizaron estudios de las distribuciones espaciales de los complejos formados.

En el marco de la metodología presentada no fue posible explicar las desviaciones encontradas en las bandas espectroscópicas. Tampoco fue evaluada, desde el punto de vista energético y estérico, la presencia de átomos de Xe en la segunda capa de vecinos. Esto último podría modificar los resultados espectroscópicos obtenidos.

CONCLUSIONES

Con los métodos DIM y de dinámica molecular con transiciones cuánticas se ha podido realizar un estudio del proceso de fotoexcitación del mercurio atómico embebido en matrices puras de argón, cuando entre sus vecinos más próximos se incluyen átomos de xenón. Los resultados de la simulación describen cualitativamente la data espectroscópica experimental. En términos absolutos las desviaciones entre el experimento y la simulación no fueron mayores del 3%. Se pudo describir el aporte de las diferentes configuraciones a las bandas de absorción y emisión.

La inclusión de átomos de xenón en la primera capa de vecinos afecta el comportamiento temporal de las poblaciones electrónicas, retardando la respuesta del sistema con el incremento de la cantidad de átomos de Xe.

Tal como se ha reportado en trabajos previos el aporte a la fluorescencia de cada configuración estudiada tiene lugar a partir del nivel adiabático de menor energía.

La emisión correspondiente a la configuración $n = 1$ no es debido a la formación del complejo molecular diatómico $[\text{Hg}(^3\text{P}_1)\text{-Xe}]^*$ como predice el experimento, sino a la formación del complejo $[\text{Ar-Hg}(^3\text{P}_1)\text{-Xe}]^*$

RECOMENDACIONES

Se propone ampliar el estudio de estos procesos considerando también la inclusión de átomos de Xe en la segunda capa de vecinos próximos a la impureza.

- [1] V. V. Goldman, "Debye-Waller factors in rare-gas solids", *Phys. Rev.* 174 (1968) 1041
- [2] E. Boursey, M. C. Castex, and V. Chandrasekharan, "A priori calculation of the $n = 1$ valence exciton of solid neon", *Phys. Rev. B* 16 (1977) 2858
- [3] I. Ya. Fugol, "Excitons in rare-gas crystals", *Adv. Phys.* 27 (1978) 1
- [4] I. Ya. Fugol, "Free and self-trapped excitons in cryocrystals: Kinetics and relaxation processes", *Adv. Phys.* 37 (1988) 1
- [5] C. M. Weinert, F. Forstmann, H. Abe, R. Grinter, and D. M. Kolb, "Line shape analysis for absorption spectra of matrix isolated gold atoms", *J. Chem. Phys.* 77 (1982) 3392
- [6] L. C. Balling and J. J. Wright, "Use of dimer potentials to calculate the energy levels of alkali atoms in rare-gas matrices", *J. Chem. Phys.* 79 (1983) 2941
- [7] N. Schwentner and M. Chergui, "A model potential for Rydberg states of alkali atoms in rare gas matrices", *J. Chem. Phys.* 85 (1986) 3458
- [8] M. E. Fajardo, "Classical Monte Carlo simulations of relaxed trapping site structures in Li atom doped solid Ne", *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 119
- [9] I. Gersonde and H. Gabriel, "Molecular dynamics of photodissociation in matrices including nonadiabatic processes", *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 2094
- [10] R. Zadoyan, Z. Li, P. Ashjian, C.C. Martens, and V. A. Apkarian, "Femtosecond dynamics of coherent photodissociation-recombination of I₂ isolated in matrix Ar", *Chem. Phys. Lett.* 218 (1994) 504
- [11] C. R. Gonzalez, S. Fernandez-Alberti, J. Echave, and M. Chergui, "Vibrational coherence and nonadiabatic dynamics in the condensed phase", *J. Chem. Phys.* 116 (2002) 3343
- [12] E. D. Potter, Q. Liu, and A. H. Zewail, "Femtosecond reaction dynamics in macroclusters - effect of solvation on wave-packet motion", *Chem. Phys. Lett.* 200 (1992) 605
- [13] Q. Liu, J.-K. Wang, and A. H. Zewail, "Femtosecond dynamics of dissociation and recombination in solvent cages", *Nature* 364 (1993) 427
- [14] J.-K. Wang, Q. Liu, and A. H. Zewail, "Solvation ultrafast dynamics of reactions. 9. Femtosecond studies of dissociation and recombination of iodine in argon clusters", *J. Phys. Chem.* 99 (1995) 11309
- [15] A. V. Benderskii, R. Zadoyan, and V. A. Apkarian, "Caged spin-orbit excited $\text{I}^*(2\text{P}_{1/2}) + \text{I}^*(2\text{P}_{1/2})$ atom pairs in liquids and in cryogenic matrices: Spectroscopy and dipolar quenching", *J. Chem. Phys.* 107 (1997) 8437
- [16] F. Vigliotti, L. Bonacina, and M. Chergui, "Structural dynamics in quantum solids. II. Real-time probing of the electronic bubble formation in solid hydrogens", *J. Chem. Phys.* 116 (2002) 4553
- [17] M. E. Fajardo, S. Tam, T. L. Thompson, and M. E. Cordonnier, "Spectroscopy and reactive dynamics of atoms trapped in molecular hydrogen matrices", *Chem. Phys.* 189 (1994) 351
- [18] P. G. Carrick, en *High Energy Density Matter Contractors Conference*, ed. T. L. Thompson (USA Phillips Laboratory, Edwards Air Force Base, 1993)
- [19] M. E. Fajardo, "Matrix isolation spectroscopy of metal atoms generated by laser ablation. II. The Li/Ne, Li/D₂, and Li/H₂ systems", *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 110
- [20] M. E. Fajardo, P. G. Carrick, and J. W. Kenney III, "Matrix isolation spectroscopy of metal atoms generated by laser ablation. I. The Li/Ar, Li/Kr, and Li/Xe systems", *J. Chem. Phys.* 94 (1991) 5812
- [21] P. C. Souers, en *Hydrogen properties for fusion energy* (University of California Press, Berkeley, 1986)
- [22] *Spectroscopy of Matrix Isolated Species*, ed. R. J. H. Clark and R. E. Hester (Wiley, Chichester, 1989)
- [23] *Chemistry and Physics of Matrix Isolated Species*, ed. L. Andrews and M. Moskovitz (North Holland, Amsterdam, 1989)
- [24] C. Crepin and A. Tramer, "Spectra and relaxation paths of $\text{Hg}(3\text{P}_1)$ in rare gas matrices", *J. Chem. Phys.* 97 (1992) 4772
- [25] J. Helbing, A. Haydar, and M. Chergui, "Spectroscopy and energy relaxation processes of Hg_2 and Hg in solid Ne", *Chem. Phys. Lett.* 310 (1999) 43

- [26] M. Amyot, G. Mierle, D. R. S. Lean, and D. J. McQueen, "Sunlight-induced formation of dissolved gaseous Hg in lake waters", *Environ. Sci. Technol.* 28 (1994) 2366
- [27] J. Jortner, en *Femtochemistry, Chemistry and Physics of Ultrafast Processes in Molecular Systems*, ed. M. Chergui (World Scientific, Singapore, 1996)
- [28] Z. Li, R. Zadoyan, V. A. Apkarian, and C. C. Martens, "Femtosecond many-body dynamics of caging: Experiment and simulation of I₂ photodissociation-recombination in solid Ar", *J. Phys. Chem.* 99 (1995) 7453
- [29] C. Jeannin, M. T. Portella-Orbeli, S. Jimenez, F. Vigliotti, B. Lang, and M. Chergui, "Femtosecond dynamics of electronic 'bubble' in solid argon: Viewing the inertial response and the bath coherences", *Chem. Phys. Lett.* 316 (2000) 51
- [30] G. Rojas-Lorenzo, J. Rubayo-Soneira, M. Chergui, S. Fernandez-Alberti, "Non-adiabatic dynamics of excited Hg(3P₁) in Ar matrices", *Journal of Physical Chemistry A* 107, 8225-8231, 2003
- [31] G. Rojas-Lorenzo, J. Rubayo-Soneira, S. Fernández Alberti, "Dynamics of exciplex formation in rare gas media", *Chemical Physics* 362, 34-40, 2009
- [32] M. A. Collier, J. G. McCaffrey, "Luminescence spectroscopy of P-3(1) and P-3(0) state atomic mercury isolated in solid Ar, Kr, and Xe", *J. Chem. Phys.* 119 (2003) 11878
- [33] M. A. Collier, J. G. McCaffrey, "A pair-potentials analysis of the emission spectroscopy of P-3(1) state atomic mercury isolated in solid Ar, Kr, and Xe", *J. Chem. Phys.* 119 (2003) 11888
- [34] K. Fuke, T. Saito, and K. Kaya, "Electronic spectra of van der Waals molecules HgNe, HgAr, and HgKr in a supersonic jet", *J. Chem. Phys.* 81 (1984) 2591
- [35] K. Yamanouchi, J. Fukuyama, H. Horiguchi, S. Tsuchija, K. Fuke, T. Saito, and K. Kaya, "Interatomic potentials of HgXe van der Waals complex formed in supersonic jets as studied by laser induced fluorescence spectroscopy", *J. Chem. Phys.* 85 (1986) 1806
- [36] M. C. Duval, O. B. D'Azy, W. H. Breckenridge, C. Jouvet, and B. Soep, "The structure of several electronic states of the Hg-Ar complex as determined by laser double resonance in a supersonic jet", *J. Chem. Phys.* 85 (1986) 6324
- [37] K. Yamanouchi, S. Isogai, M. Okunishi, and S. Tsuchija, "Interatomic potentials of A 30+ and B 31 states of HgHe, HgNe, and HgAr van der Waals complexes", *J. Chem. Phys.* 88 (1988) 205
- [38] V.S. Batista and D.F. Coker, "Nonadiabatic molecular dynamics simulation of ultrafast pump-probe experiments on I₂ in solid rare gases", *J. Chem. Phys.* 106 (1997) 6923
- [39] V. S. Batista and D. F. Coker, "Nonadiabatic molecular dynamics simulation of photodissociation and geminate recombination of I₂ liquid xenon", *J. Chem. Phys.* 105 (1996) 4033
- [40] O. Roncero, J. A. Beswick, N. Halberstadt, and B. Soep, en *Dynamics of Polyatomic van der Waals Complexes*, eds: N. Halberstadt, and K. C. Janda (Plenum Press, New York 1990)
- [41] J. Zúñiga, A. Bastida, A. Requena, N. Halberstadt, and J. A. Beswick, "A theoretical study of the HgAr₂(3P₁ $\rightarrow$ 1S₀) vibronic spectrum", *J. Chem. Phys.* 98 (1993) 1007
- [42] A. Bastida, J. Zúñiga, A. Requena, N. Halberstadt, and J. A. Beswick, "Excited state dynamics in HgAr₂: Statistical analysis of vibrational state distribution", *Faraday Discuss.* 97 (1994) 131
- [43] H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, A. DiNola, and J. R. Haak, "Molecular-dynamics with coupling to an external bath", *J. Chem. Phys.* 81 (1984) 3684
- [44] F. O. Ellison, J. C. Patel, "Method of Diatomics in Molecules .3. H₂X + X₂H (X-H, F, Cl, Br, + I)", *J. Am. Chem. Soc.* 86 (1964) 2115
- [45] H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W.F. van Gunsteren, A. DiNola, and J. R. Haak, "Molecular dynamics with coupling to an external bath" *J. Chem. Phys.* 81 (1984) 3684

MODELACIÓN DE LA CONDUCCIÓN TRANSVERSAL EN COMPÓSITOS SUPERCONDUCTORES

A. BORROTO^{a†}, L. DEL RÍO^a, M. ARRONTE^{b,c} Y E. ALTSHULER^a

a) Laboratorio de superconductividad, LIES, IMRE-Facultad de Física, Universidad de la Habana, 10400 Habana, Cuba; aborrito@fises.fisica.uh.cu†

b) Laboratorio de Láser Tecnológico, IMRE, Universidad de la Habana, 10400 Habana, Cuba

c) Laboratorio de Tecnología Láser, CICATA-IPN, Altamira 89600, México

† autor para la correspondencia

Se presenta un modelo teórico para dar solución a la distribución de la corriente en compósitos superconductor-metal y se verificó su validez para el caso en que la relación entre ambos componentes se mantiene constante a lo largo de la muestra, que es la situación típica en la dirección longitudinal de conducción. Se obtuvo la distribución de corriente para el caso particular de una cinta de Bi2223/Ag en la dirección transversal, donde la proporción entre el superconductor y la plata es en general no uniforme. Los resultados muestran que las variaciones bruscas de la proporción entre el superconductor y la plata no influyen fuertemente en la distribución de la corriente.

A theoretical model that describes the current distribution in superconductor-metal composites is presented. The model is verified in a case when the relation between both components is kept constant along the sample, typical of longitudinal conduction. The current distribution for a Bi2223/Ag tape in the transversal direction was obtained, where the proportion between the superconductor material and silver is non uniform. Results show that abrupt changes in proportion between superconductor and silver do not cause a significant influence on the current distribution.

Palabras Clave. 74.25.Fy, 74.72.Hs, 74.78.Bz, 74.81.Bd.

INTRODUCCIÓN

Los materiales superconductores se caracterizan por tener resistencia eléctrica nula y ser diamagnéticos perfectos por debajo de cierta temperatura crítica (T_c). Estas propiedades hacen que los superconductores tengan una amplia gama de aplicaciones que van desde delicados sensores de campo magnético (SQUID's) y otros dispositivos electrónicos hasta equipos de resonancia magnética nuclear con potentes imanes superconductores. En aplicaciones donde sea necesario transportar grandes corrientes son muy utilizadas las cintas del superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$ embebido en una matriz de plata (Bi2223/Ag). Estas cintas generalmente se fabrican mediante un método conocido como "powder in tube" que básicamente consiste en llenar de polvo del material superconductor cavidades tubulares existentes en una matriz de plata cilíndrica y luego aplicar varias fases de tratamiento térmico y aplanado hasta lograr la forma plana[1]. En la literatura existe un sinnúmero de publicaciones en las que se estudian las propiedades de transporte de cintas superconductoras a lo largo de la dirección longitudinal. Sin embargo, son muy pocas las que estudian las propiedades de transporte según la dirección transversal. Aunque pueda parecer que en la dirección transversal tiene poca importancia el estudio de las propiedades de transporte, en determinadas circunstancias como son la aparición de rupturas transversales y el establecimiento del estado crítico, resulta que la conducción en esta dirección es determinante sobre la longitudinal.

En este trabajo se presenta un modelo teórico que permite obtener la distribución de corriente en cintas en las cuales se

tenga al material superconductor unido a un metal cualquiera a través de una única interfaz.

En la literatura existen modelos que obtienen la distribución de corriente en cintas superconductoras suponiendo que el material superconductor se encuentra todo el tiempo en estado no disipativo. El modelo que se muestra tiene en cuenta la posibilidad de que en alguna sección del puente esta restricción no esté presente.

Para comprobar la validez del modelo se supuso que el metal con el cual se encontraba mezclado el superconductor era plata y se resolvió el caso más sencillo, en el cual el superconductor y la plata se encontraban en una misma proporción a lo largo de todo el puente. Después se resolvió el caso de una cinta real de $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$ embebido en Ag (Bi2223/Ag) en la dirección transversal, incorporando algunos datos experimentales.

MODELO TEÓRICO

El presente modelo supone al superconductor y al metal en el cual se encuentra embebido, que en general puede ser cualquiera, separados por una única interfaz como se muestra en la Figura 1. En la misma la corriente fluye en la dirección del eje x, que puede corresponder a la dirección longitudinal o transversal de la cinta. Obsérvese que los filamentos superconductores han sido "colapsados" en la parte inferior (lo que se explicará en detalle más adelante).

Al igual que Y. Fang y colaboradores², el elemento de volumen mostrado en la Figura 1 se puede representar mediante el circuito diferencial equivalente que se muestra en la Figura 2.

Aquí dR_m es la resistencia del metal que está en contacto con el superconductor y ρ_m es su resistividad; R_i es la resistencia interfacial entre el metal y el superconductor y ρ_i es la resistividad interfacial (en unidades de $\Omega \text{ cm}^2$); dR_{sc} y ρ_{sc} son la resistencia y la resistividad del superconductor cuando se encuentra en estado normal, θ es la función paso unitario de Heaviside y j_c es la densidad de corriente crítica por encima de la cual el superconductor comienza a disipar. La función θ refleja el hecho de que cuando la corriente que circula por el material superconductor en una posición determinada del puente es menor que la corriente crítica, la resistencia del superconductor se anula en esta posición. En caso contrario el superconductor se encuentra en estado normal y su resistencia será la de un material con resistividad ρ_{sc} . Los valores de resistencia referidos anteriormente, así como el de θ , dependen de la posición x .

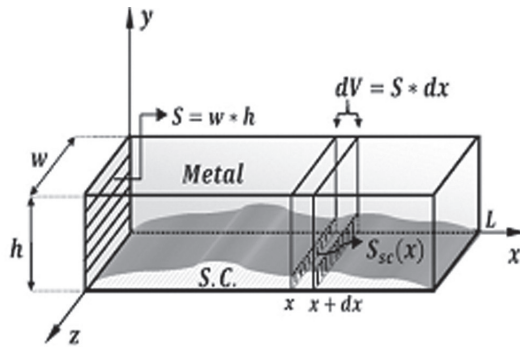


Figura 1. Esquema del compuesto superconductor.

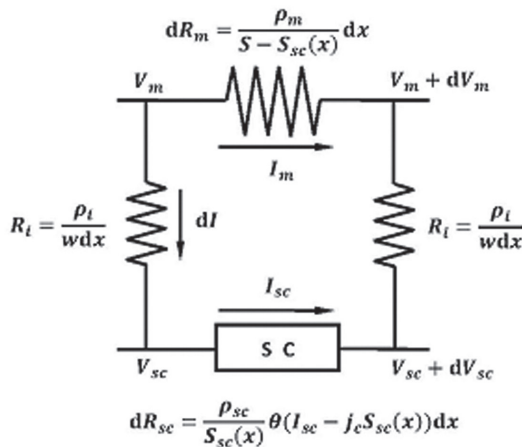


Figura 2. Circuito equivalente al elemento dV en la posición x del puente.

Las ecuaciones que rigen el comportamiento del circuito de la Figura 2 son:

$$dV_m(x) = \frac{\rho_m I_m(x)}{S - S_{sc}(x)} dx \quad (1)$$

$$dV_{sc}(x) = \frac{\rho_{sc} I_{sc}(x)}{S_{sc}(x)} \theta(I_{sc}(x) - j_c S_{sc}(x)) dx \quad (2)$$

$$V_m(x) - V_{sc}(x) = \frac{\rho_i}{w} \frac{dI(x)}{dx} \quad (3)$$

Derivando (3) respecto a x , utilizando después (1) y (2), se obtiene la siguiente ecuación:

$$-\frac{\rho_m I_m(x)}{S - S_{sc}(x)} + \frac{\rho_{sc} I_{sc}(x)}{S_{sc}(x)} \theta(I_{sc}(x) - j_c S_{sc}(x)) = \frac{\rho_i}{w} \frac{d^2 I}{dx^2} \quad (4)$$

Para la corriente se cumple que:

$$I_0 = I_{sc} + I_m \quad (5)$$

$$dI = dI_{sc} = -dI_m \quad (6)$$

La ecuación (5) se debe al hecho de que la corriente total se distribuye entre el metal y el superconductor y la ecuación (6) refleja que un incremento en la corriente que circula por el superconductor sólo es posible si disminuye la corriente que circula por el metal.

Introduciendo (5) y (6) en (4), y reagrupando convenientemente los términos:

$$-\frac{\rho_i}{w} \frac{d^2 I_m}{dx^2} + \left[\frac{\rho_m}{S - S_{sc}(x)} + \frac{\rho_{sc} \theta(I - I_m - j_c S_{sc}(x))}{S_{sc}(x)} \right] I_m = \frac{\rho_{sc} I}{S_{sc}(x)} \theta(I - I_m - j_c S_{sc}(x)) \quad (7)$$

Si se supone que la corriente que se le suministra al puente entra y sale por el metal (como se esperaría de dos contactos colocados sobre una de las caras anchas de la cinta), las condiciones iniciales para la ecuación (7) serán:

$$I_m(0) = I_m(L) = I_0 \quad (8)$$

La expresión (7) es una ecuación diferencial no lineal de segundo orden que tiene a x como variable independiente y su solución da cómo se distribuye la corriente en el metal a lo largo de todo el puente. El problema está en que se tiene involucrada a la función paso unitario de Heaviside, la cual hace que una solución analítica sea solo posible para casos particulares. Esto obliga a darle una solución numérica a la ecuación, para lo cual se adimensionalizó como sigue:

$$-\frac{d^2 u(x_\eta)}{dx_\eta^2} + \left[\frac{\rho}{1-s(x_\eta)} + \frac{\theta \left(1 - \frac{s(x_\eta)}{j} - u(x_\eta) \right)}{s(x_\eta)} \right] u(x_\eta) =$$

$$= \frac{1}{s(x_\eta)} \theta \left(1 - \frac{s(x_\eta)}{j} - u(x_\eta) \right) \quad (9)$$

con condiciones de frontera:

$$u(0) = u(1) = 1 \quad (10)$$

donde:

$$u(x) = \frac{I_m(x)}{I}, \quad s(x) = \frac{s_{sc}(x)}{S}, \quad S = w \cdot h,$$

$$\rho = \frac{\rho_m}{\rho_{sc}}, \quad j = \frac{I}{S j_c}, \quad x_\eta = \frac{x}{\eta}, \quad l = \frac{L}{\eta} \quad (11)$$

son magnitudes adimensionales y la variable x_η ahora está en unidades de η , o sea, refleja cuántas veces es x mayor que una longitud característica a la que se le llamó η donde:

$$\eta = \sqrt{\frac{\rho_i h}{\rho_{sc}}} \quad (12)$$

Para resolver numéricamente la ecuación (9) se utilizó un algoritmo conocido como algoritmo Gear3,4 o “predictor-corrector”. Este algoritmo es utilizado, dada su eficiencia y estabilidad numérica, para resolver ecuaciones diferenciales de segundo orden y ha sido probado, al menos, en problemas de dinámica molecular donde intervienen las ecuaciones de movimiento de Newton5.

SOLUCIÓN PARA $S(x)$ CONSTANTE

Tanto en este caso como en el que sigue se supondrá que el metal en que se encuentra embebido el superconductor es plata, por lo que $\rho_m = \rho_p = 1.6 \mu\Omega \text{ cm}$, la longitud transversal del puente es $L = 3.96 \text{ mm}$, y $S = w \times h = 0.3 \times 0.23 \text{ mm}^2$ ya que la cinta usada en nuestro laboratorio tiene estas características. Además, para las mismas, $j_c = 6500 \text{ A/cm}^2$ y se supondrá que $\rho_{sc} \gg \rho_p$.

Como se puede ver, la solución de la ecuación (9) depende de $s(x)$, o sea, de la distribución en la proporción que hay a lo largo del puente entre el superconductor y la plata. Para comenzar, se verá el caso en que $s(x)$ es una función constante a lo largo de todo el puente. Esto servirá para comprobar la validez del método de solución numérico utilizado aquí, mediante una comparación con la solución analítica de este caso obtenida y corroborada experimentalmente por Y. Fang y colaboradores[2].

La solución analítica dada por los propios autores es:

$$I_p(x) = I_0 \left\{ \left[\frac{1 - \cosh(\lambda L)}{\sinh(\lambda L)} \right] \sinh(\lambda x) + \cosh(\lambda x) \right\} \quad (13)$$

donde:

$$\lambda = \sqrt{\frac{\rho_p}{\rho_i d_p}} \quad (14)$$

Aquí d_p es el grosor de la capa de plata.

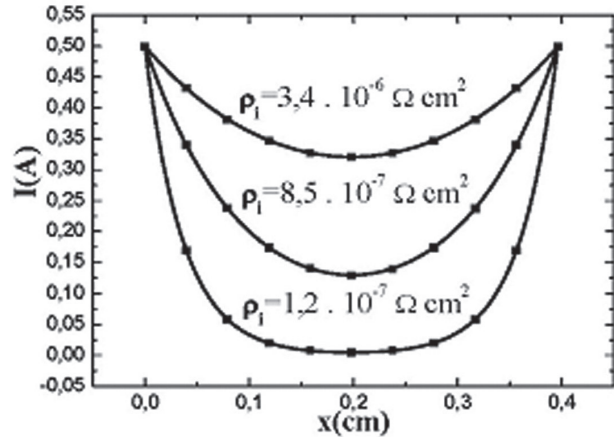


Figura 3. Comportamiento de la corriente en la plata a lo largo del puente a medida que varía la resistividad interfacial. La línea continua representa la solución analítica dada por la ecuación (13) y los puntos representan la solución numérica dada por la ecuación (9).

En la Figura 3 se compara la solución numérica (puntos), dada por la ecuación (9), y la solución analítica (línea continua), dada por la ecuación (13). Solo se mostraron algunos puntos de la solución numérica para una mejor visualización. Para la obtención de los gráficos se utilizó $d_p = 0.18 \text{ mm}$, que coincide con el valor medio de la magnitud correspondiente en nuestra cinta.

Vale aclarar que este caso, resuelto con detalle en la ref. [2], puede ser utilizado para describir lo que ocurre en la dirección longitudinal de la cinta superconductora que se trata.

SOLUCIÓN PARA UNA CINTA REAL DE Bi2223/AG EN LA DIRECCIÓN TRANSVERSAL

A continuación se resolverá la ecuación (9) para un caso en el que la proporción de plata y superconductor es más compleja. En particular se dará solución a la distribución de corriente en la dirección transversal para una cinta real de $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$ embebido en Ag (Bi2223/Ag). O sea, en este caso el eje x del modelo es perpendicular a la dirección más “larga” de la cinta.

El modelo desarrollado parte de la suposición de que la plata y el superconductor están separados por una interfaz única. En la práctica, como se puede ver en la Figura 4 (arriba), esto no es así, ya que en realidad los filamentos del BSCCO se encuentran embebidos en la plata. Para resolver este problema, se supondrá que la interconexión entre los filamentos es buena por lo que en cada posición x del puente se colapsarán todos los filamentos de superconductor que se encuentren en la misma. De esta forma se tiene que la superficie que separa a la plata del superconductor tiene la forma que se muestra en la Figura 4 (abajo). Este método ha sido utilizado antes por nuestro equipo.

La longitud del puente es igual a 4.2 mm, pero aquí se resolverá la ecuación para un puente de largo igual a 3.96 mm

ya que en los extremos donde no hay superconductor no es válida la ecuación (9) y lo que se cumple es la ley de Ohm.

Para un mismo valor de resistividad interfacial se estudió cómo variaba la distribución de corriente a lo largo del puente a medida que la corriente suministrada (I_0) iba aumentando. Como se puede ver en la Figura 5, para corrientes pequeñas, ésta se comporta como en el caso en que $s(x)$ es constante (ver Figura 3 cuando $\rho_i = 3.4 \mu\Omega \text{ cm}^2$). Es decir, cuando todo el puente está en estado superconductor las irregularidades de $s(x)$ no ejercen influencia notable sobre la distribución de la corriente. A medida que aumenta la corriente, algunas partes del superconductor empiezan a disipar energía (empezando por las de menor $s(x)$), lo que hace que empiecen a hacerse notar estas irregularidades en la distribución de la corriente.

Es importante destacar que estas irregularidades en la corriente no son tan fuertes como pudiera esperarse. En la Figura 6 se ve que los picos en la corriente se deben a

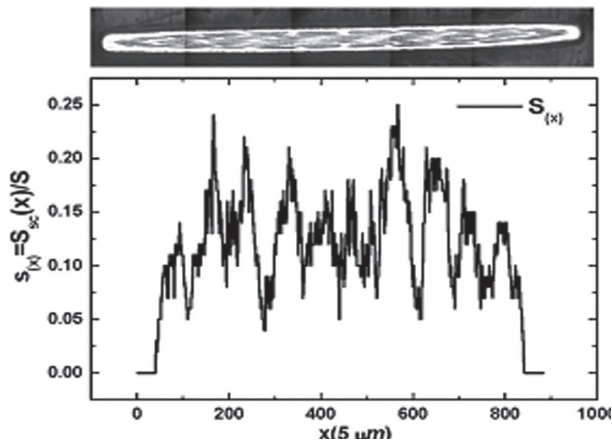


Figura 4: Arriba, sección transversal de una cinta de Bi2223/Ag. En negro se muestran las secciones de los filamentos de BSCCO embebidos en plata (blanco). Abajo, proporción de superficie superconductor entre la superficie total para cada posición x del puente. El valor de $5 \mu\text{m}$ como unidades en el eje de las x se obtiene de dividir $L=4.2 \text{ mm}$ entre 850 pixeles que es el largo de la imagen.

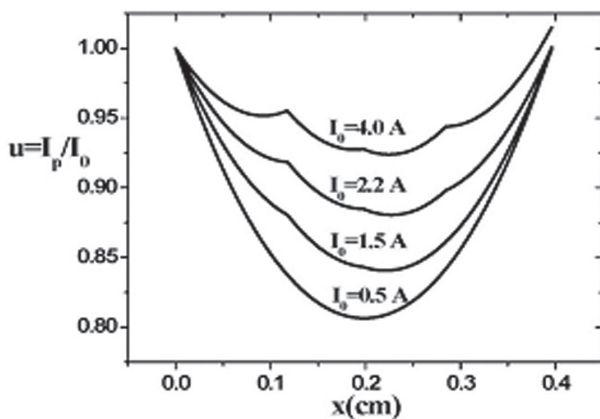


Fig. 5: Distribución de la corriente en la plata para distintos valores de corriente suministrada (I_0) y una resistividad interfacial $\rho_i = 6.8 \mu\Omega \text{ cm}^2$.

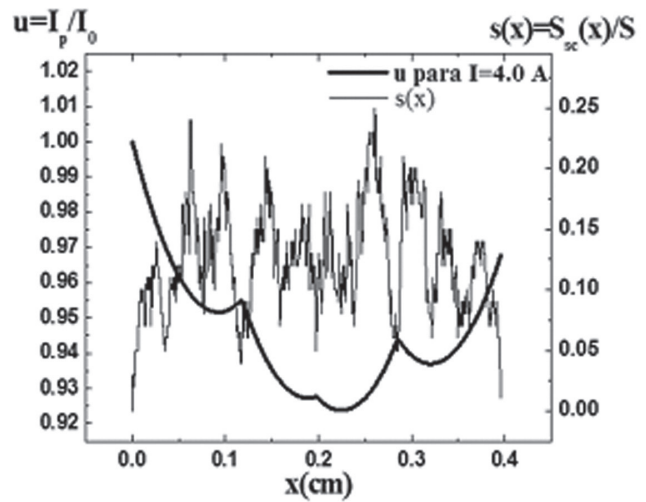


Figura 6. Comparación entre la distribución de corriente para $I=4.0 \text{ A}$ y la forma de $s(x)$.

los mínimos de $s(x)$. Las demás irregularidades prácticamente no se hacen notar. O sea, sólo los cambios más bruscos en la interfaz que hay entre el superconductor y la plata provocan cambios significativos en la distribución de la corriente.

CONCLUSIONES

Se desarrolló un modelo teórico que permite hallar la distribución de corriente en compósitos superconductores. Se verificó la validez del modelo para el caso en que el superconductor y la plata están en la misma proporción. Se muestran los resultados para el caso de la conducción transversal de una cinta de Bi2223/Ag, donde esta proporción no es uniforme. Los mismos muestran que la no uniformidad en la proporción entre la plata y el superconductor no influye fuertemente en la distribución de la corriente.

Actualmente en nuestro equipo se realizan mediciones en cintas de Bi2223/Ag que permitirán comparar en detalle nuestro modelo teórico con resultados experimentales concretos.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a J. A. Batista-Leyva por haber inspirado parte de este trabajo, y por útiles discusiones. También a Y. Núñez por sus consejos sobre los métodos numéricos. El sistema de proyectos "Alma Mater" de la Universidad de la Habana financió parcialmente este trabajo.

- [1] P. Vase, P. Skov-Hansen, Z. Han, H. F. Poulsen y T. Frello, European Conference on Applied Superconductivity, The Netherlands, 1997.
- [2] Y. Fang, S. Danyluk, Y. S. Cha y M. T. Lanagan, J. Appl. Phys. 79,947 (1996).
- [3] C. W. Gear, The numerical integration of ordinary differential equations of various orders, Technical Report ANL 7126, Argonne National Laboratory, 1966.
- [4] C. W. Gear, Numerical initial value problems in ordinary differential equations, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1971.
- [5] T. Pöschel y T. Schwager, Computational Granular Dynamics, Springer, 2005.

CdTe DEPOSITADO POR SUBLIMACIÓN ISOTÉRMICA A CORTA DISTANCIA EN CELDAS SOLARES DE CdS/CdTe

P. G. ZAYAS- BAZÁN^a, G. CONTRERAS- PUENTE^b, G. SANTANA- RODRÍGUEZ^c, E. HERNÁNDEZ^a, O. CALZADILLA^a, K. GUTIÉRREZ Z-B^a, J. SASTRE- HERNÁNDEZ^b, O. DE MELO^{a†}

a) Facultad de Física- IMRE, Universidad de La Habana, Cuba; omelo@fisica.uh.cu

b) Escuela Superior de Física y Matemática del IPN, Edificio 9, U.P. ALM. Lindavista, Mexico, C.P. 07738, Mexico, D.F.

c) Instituto de Investigación en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universtaria, A.P. 70-360, Coyoacán 04510, Mexico D.F.
† autor para la correspondencia

Se reporta la preparación de estructuras de CdS/CdTe y el uso preliminar de las mismas para la fabricación de celdas solares. Las capas de CdS fueron preparadas por baño químico y las de CdTe por sublimación isotérmica a corta distancia con exposición alternada de la superficie de crecimiento a las fuentes de Cd y Te. Igualmente el tratamiento térmico en CdCl₂ se realizó exponiendo isotérmicamente la muestra a los vapores de CdCl₂. Estos procedimientos para depositar el CdTe y realizar el tratamiento térmico representan una novedad en este tipo de celdas. Se reportan resultados preliminares de celdas solares fabricadas con estos procedimientos novedosos.

The preparation of CdS/CdTe structures as well as its preliminary use for the fabrication of solar cells is reported. CdS films were prepared using the chemical bath technique while CdTe films by isothermal close space sublimation with alternated exposure to Cd and Te sources in isothermal conditions. Annealings in CdCl₂ were also performed in isothermal conditions by exposing the sample to CdCl₂ vapors. Preliminary results of solar cells fabricated with these novel procedures are reported.

Palabras Clave. Thin films II-V, II-VI solar cells, 88.40.Jm; II-VI semiconductors, 81.05.Dz; growth from vapor phase, 81.15.Kk

INTRODUCCIÓN

A nivel mundial existe una gran actividad en investigación de celdas solares como consecuencia del interés por resolver los problemas asociados al uso predominante de hidrocarburos como fuente primaria de energía. Debido a la escasez progresiva de petróleo y gas todo indica que en los siguientes 15 a 20 años una fuente renovable de energía cada vez más confiable, robusta y de menor costo será la generación de electricidad a partir de la radiación solar, usando convertidores fotovoltaicos o celdas solares.

Las celdas solares más utilizadas ahora son aquellas basadas en silicio cristalino o poli-cristalino, pero una nueva generación de celdas solares en forma de películas delgadas se está expandiendo rápidamente en el mercado mundial. Los materiales más estudiados con este propósito son el CdTe y el CuInGaSe₂ en contacto con el CdS, el cual es utilizado como la llamada capa ventana. El primero de estos semiconductores ha permitido la realización de celdas solares con eficiencia máxima de 16.5 %. Esta, sin embargo, ha aumentado solamente en menos de 1% en los últimos 15 años; de hecho se han publicado artículos que explican las razones físicas de este estancamiento[1]. Las celdas basadas en el segundo material han llegado a 19.9 %. A pesar de esto, el mayor conocimiento del CdTe y su tecnología debe permitir en el futuro cercano una producción más robusta y con mayor eficiencia.

Esto implica que se deben buscar alternativas que permitan mejorar la eficiencia de celdas solares basadas en CdTe, y puedan superarse algunas limitaciones asociadas a las características de este material. Uno de los aspectos que se propone es el desarrollo de nuevas técnicas de crecimiento que permitan un mejor control de los parámetros de los materiales crecidos. En este trabajo estamos presentando por primera vez el crecimiento del CdTe así como los tratamientos intermedios en cloruro de cadmio, utilizando la técnica de sublimación isotérmica a corta distancia (ICSS por sus siglas en inglés)[2].

En nuestro trabajo usaremos la configuración típica de la celda que posee tres capas: una fina capa de óxido de Indio y Estaño (ITO) como conductor transparente para el contacto anterior; una capa de CdS como ventana y región n de la junta; y una capa de CdTe como absorbente. Sobre esta capa se depositó el contacto posterior de Cu/Ag.

PREPARACIÓN DE LOS MATERIALES

a) Crecimiento del CdS por la técnica de Deposición en Baño Químico.

Las capas de CdS se obtuvieron por el método de Deposición por Baño Químico (Chemical Bath Deposition, CBD, en inglés). Esta técnica consiste en la precipitación controlada de un compuesto sobre un sustrato conveniente a partir de soluciones que contie-

nen a los reactantes. Para ello se prepara un baño con una solución que contiene una sal de cadmio; ya sea en forma de nitrato, cloruro, sulfato o acetato, y además con una solución de un agente reductor que contiene azufre. De esta forma en la solución alcalina el agente reductor se descompone y suministra los iones S^{2-} al baño químico y los cationes Cd^{2+} se obtienen de su respectiva sal.

En este trabajo se usó $CdCl_2$ y Tiourea ($CS(NH_2)_2$) como agente reductor. El Baño químico entonces estuvo formado por una mezcla de las siguientes soluciones acuosas: $CdCl_2$ (20 ml), KOH (50 ml), NH_4NO_3 (20 ml), $CS(NH_2)_2$ (20 ml). Cada solución fue preparada disolviendo en 100 ml de agua bidestilada 0.365g de $CdCl_2$, 12.00g de NH_4NO_3 , 1.52g de $CS(NH_2)_2$ y para el caso de el KOH se disolvieron 7.01g en 250 ml de agua bidestilada. Los sustratos que se utilizaron fueron vidrios de Corning recubiertos con una capa de óxido de Indio y Estaño (ITO). Vertiendo en un beaker todas las soluciones excepto la Tiourea. Este se sumerge en un baño de maría con temperatura controlada y agitación magnética como se muestra en la Fig. 1. Cuando la mezcla llega a una temperatura de 65 °C se le agrega la Tiourea y cuando la solución comienza a colorearse los sustratos son sumergidos verticalmente, manteniéndolos el tiempo de crecimiento, que fue de 2 horas. A lo largo de todo el crecimiento se toman medidas del pH el cual varía de 10 (al comienzo de la reacción) a 7 (cuando termina el crecimiento). Al final de este tiempo se enjuagan con abundante agua destilada, observándose una capa amarilla en la superficie (Fig. 2).

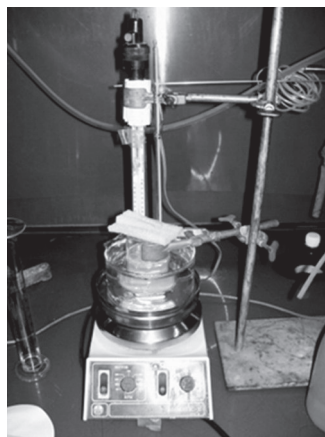


Figura 1: Montaje experimental de la técnica de Deposición por Baño Químico

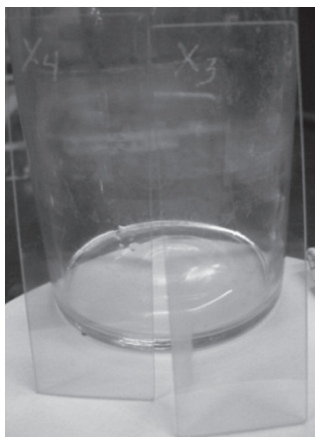


Figura 2: Vidrios después del crecimiento

Los factores que influyen directamente en la velocidad de crecimiento de la capa de CdS son la temperatura del baño, la concentración de los reaccionantes y el pH de la disolución. De aquí que un correcto control de todos estos factores propicia la obtención de una capa de gran calidad.

b) Crecimiento del CdTe por la técnica de Sublimación Isotérmica a Corta Distancia (SICD).

Algunas de las técnicas de crecimiento de transporte químico de fase vapor emplean la configuración de sublimación a distancia cercana. Las capas son depositadas a partir de la sublimación del compuesto que se quiere crecer, en un ambiente cerrado con el menor volumen posible con el objetivo de facilitar el transporte de los vapores entre la fuente y el sustrato. En el

modo tradicional de esta técnica la fuente y el sustrato son colocados a una distancia muy pequeña, con la fuente a una temperatura más alta que el sustrato. Generalmente, tanto la fuente como el sustrato son del mismo material y es la diferencia de temperatura la fuerza motriz del crecimiento. Si se utilizase una configuración de sublimación a corta distancia en condiciones isotérmicas uno podría esperar que, desde el punto de vista termodinámico, el crecimiento no ocurriría. Una o unas pocas capas atómicas del compuesto fuente sobre el sustrato (de otro material) serían suficientes para inhibir el crecimiento, al alcanzarse la igualdad de potenciales químicos (presiones de vapor) entre la fuente y la capa sobre el sustrato. Por lo que se necesitaría algo más para que el crecimiento ocurra en estas condiciones.

El sistema utilizado se muestra en la Fig. 3. Los compartimentos separados para las fuentes elementales y el agujero para la purga de vapores fueron diseñados para evitar la impurificación (mezcla) entre las fuentes. La parte deslizante, además de servir como soporte del sustrato, permite su exposición secuencial a las fuentes elementales manteniendo la configuración de distancia cercana sobre ellas. El procedimiento de crecimiento de la muestra se realiza exponiéndola secuencialmente a cada fuente elemental y a la purga. Un ciclo de crecimiento consiste en la exposición, en secuencia, del sustrato a cada fuente y luego a la purga. Repitiendo el ciclo las veces que uno desee se puede obtener una muestra con un espesor proporcional al número de ciclos usados.

Esta exposición alternada es la que garantiza el crecimiento en régimen isotérmico ya que la fuerza motriz del crecimiento será la diferencia de presiones de vapor entre la fuente elemental y la superficie de crecimiento. Así, durante la exposición a una de las fuentes se producirá el recubrimiento de la superficie con el material de la fuente. Como la temperatura es igual en la fuente y en la superficie, el sistema se encuentra cerca del equilibrio y la presión de vapor es muy cercana o igual a la presión de equilibrio a la temperatura dada. Esto hace que se cumplan las condiciones de la adsorción multicapas. Al exponer la superficie de crecimiento al orificio de purga, entonces se desorbe parte de la fina capa depositada en la exposición anterior y si el tiempo en la purga es suficientemente grande, sólo quedará una capa de cerca de 1 monocapa. En estas condiciones se puede obtener epitaxia a capas atómicas. Sin embargo, si el tiempo en la purga es pequeño (o en el límite nulo), entonces no alcanza el tiempo para que se desorba toda la capa y el crecimiento puede ocurrir a razones de crecimiento mayores en cada ciclo. Adicionalmente, en el caso de tiempos de purga pequeños, puede también ocurrir que parte del gas de una fuente pueda ser transportada a la otra fuente. Cualquiera de los dos efectos arriba explicados, conducen a una velocidad de crecimiento que puede llegar a ser relativamente alta. Esto es lo que ha motivado a los autores el uso de esta técnica para el crecimiento de la capa absorbente de la celda solar, que debe tener algunas micras para una completa absorción de la radiación. La técnica presenta la ventaja de que la temperatura puede ser un poco más baja que la usada tradi-

cionalmente en la configuración a distancia cercana dado que la evaporación de las fuentes elementales puede ocurrir a temperaturas sustancialmente menores que aquellas necesarias para evaporar los compuestos. Por otra parte, el control del espesor puede ser más preciso debido a que una vez calibrado el proceso de crecimiento depende solo del número de ciclos. Otra ventaja es que no es necesario contar con los compuestos que generalmente tienen un costo mayor. Por último, en esta configuración isotérmica se requiere sólo el control de una temperatura y no de dos lo que simplifica de alguna manera la construcción del equipamiento necesario. Por otra parte, existe la desventaja de que se necesita un actuador automatizado para garantizar el movimiento del sustrato sobre las fuentes.

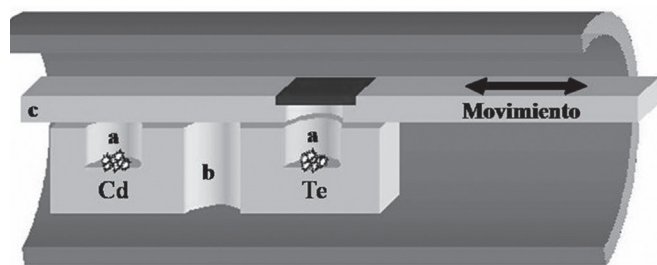


Figura 3: Esquema del sistema de sublimación isotérmica a corta distancia para el crecimiento del CdTe

Para el crecimiento de las capas de CdTe se utilizaron fuentes sólidas de Cd y Te de alto grado de pureza (provisas por Goodfellow) y como sustrato una muestra de CdS, crecida por la técnica de Deposición por Baño Químico, de dimensiones de 9x9 mm. El Te se raspó cuidadosamente para eliminar la capa de óxido de su superficie y el Cd se atacó químicamente en una solución de HNO_3 : H_2O (1:1). La muestra de CdS que será utilizada como sustrato para el crecimiento de CdTe es sumergida durante aproximadamente 1 min en agua bidestilada hirviendo y luego durante 30 s en alcohol isopropílico, dejándola secar sobre un papel de filtro.

Para el crecimiento el sustrato se coloca en el portasustrato (c, en la Fig. 3) y las fuentes elementales separadas en los orificios (a, en la Fig. 3). Se coloca el bote en un reactor de cuarzo donde primeramente se pasa un flujo de helio durante 30 min para evacuar los gases no deseados y después se hace vacío con un sistema de bombas mecánica y difusora hasta llegar a una presión en el orden de 10^{-5} mbar. Ya a esta presión, la temperatura del reactor se eleva hasta 400 °C que es la temperatura de crecimiento en todos los casos. El sustrato se mantiene sobre el orificio de purga (b, en la Fig. 3) durante el calentamiento. Una vez alcanzada la temperatura de crecimiento, el sustrato se desplaza cíclicamente sobre las fuentes elementales, sometiéndolo a sus vapores durante el tiempo de crecimiento que se determine en cada caso. Este movimiento se realiza por medio de un actuador lineal LINAK controlado por un controlador lógico programable (PLC). Entre las exposiciones a las fuentes elementales, la cavidad del sustrato se purga sobre el orificio pasante (b, en la Fig. 3) durante el tiempo de purga. Una vez concluido el crecimiento se comienza a enfriar el sistema hasta la temperatura ambiente, se elimina el vacío y se extraen tanto la muestra como los residuos del crecimiento.

c) Tratamiento térmico con CdCl_2

Un tratamiento térmico con CdCl_2 es esencial para el mejoramiento de la eficiencia de las celdas solares de CdS/CdTe [3]. Aunque ha habido durante mucho tiempo discrepancias sobre los efectos de estos tratamientos, todo parece indicar que de alguna manera tienen influencia en la estructura cristalina e interfacial de la estructura. En nuestros experimentos usamos dos variantes de tratamiento térmico en CdCl_2 , la primera consistió en colocar una pequeña pieza en un tercer hueco del bote de grafito (no mostrado en la Fig. 3) y realizar el tratamiento inmediatamente después de terminar el crecimiento sin sacar la muestra al exterior. La segunda variante, la colocación fue similar pero la estructura fue crecida en un proceso independiente y el tratamiento fue realizado después. Como resultados de algunas pruebas se observó que los tratamientos in-situ realizados según la primera variante, produjeron capas de CdTe con bordes no bien definidos y extendidas hacia los bordes del CdS. Probablemente los vapores de CdCl_2 presentes durante el crecimiento modificaron las condiciones del crecimiento, tal vez cooperando con un transporte excesivo de material. En cambio con la variante 2 las capas de CdTe presentaron bordes bien definidos. Por esta razón se escogió la segunda variante en lo adelante. Para realizar los tratamientos se eleva la temperatura del sistema hasta 380 °C, manteniendo el sustrato en el orificio de purga (b, en la Fig. 3). Cuando la temperatura del tratamiento está establecida, la muestra se desplaza hacia la fuente elemental, dejándola sobre esta durante aproximadamente 8 minutos. Este tiempo fue elegido debido a que para tiempos de tratamiento superiores, las capas de CdTe, luego de algún tiempo se fracturaban.

CARACTERIZACIÓN ÓPTICA DE LAS ESTRUCTURAS

Para la caracterización de las muestras usamos un fotoespectrómetro Hitachi UV- VIS 150-20 en el rango 200-900nm con el que se obtuvieron espectros de transmitancia y reflectancia de las capas de CdTe/CdS en diferentes configuraciones. Para el caso de las capas de CdS se hicieron mediciones de transmisión en las que se observaron franjas de interferencia en la zona de transparencia (500 – 900 nm) que permitieron ajustar el espesor. Esto no pudo hacerse con el CdTe, debido a que el ancho de la banda prohibida de este semiconductor está alrededor de 850 nm muy próximo al borde superior del rango de nuestro espectrómetro (900 nm). Entonces utilizamos el siguiente procedimiento para estimar el espesor de las capas de CdTe.

Se conoce que para los semiconductores de gap directo la relación entre la absorbancia (α) y la energía de los fotones ($\hbar\omega$) es:

$$(\alpha d)^2 = (Ad)^2(\hbar\omega - E_g) \quad (1)$$

Donde d es el espesor de la muestra, E_g la energía del ancho de la banda prohibida y A una constante que depende del semiconductor de que se trate. Por lo que si se grafica $(\alpha d)^2$ como función de $\hbar\omega$, se puede obtener el espesor de la muestra a través de la pendiente m de la parte lineal de la curva, con tal de que se conozca el valor de la constante A. De esta misma parte de la curva

también es posible obtener el valor de la energía del ancho de la banda prohibida mediante el intercepto con el eje de las energías.

En la Fig. 4 se observan los espectros de transmisión de varias muestras con diferentes espesores del CdTe. De estos gráficos se observa cualitativamente que estas muestras tienen diferentes espesores. Esto se manifiesta en que las muestras más finas pueden aún dejar pasar luz de longitudes inferiores a la correspondiente al ancho de la banda prohibida y también al hecho de tener diferentes pendientes en la región de absorción de acuerdo con la ecuación (1). De la ecuación de la absorbancia anteriormente expuesta tenemos que la pendiente del gráfico de $(\alpha d)^2$ en función de $\hbar\omega$ es:

$$m = (A d)^2 \quad (2)$$

De los gráficos de $(\alpha d)^2$ vs. $\hbar\omega$ de la Fig. 4 se obtuvo la pendiente mediante un ajuste de la parte lineal de la curva. Como no se conoce el valor de A, estos valores de la pendiente deben ser calibrados para poder determinar el espesor de las muestras. Para ello, el espesor de varias muestras se midió directamente usando un perfilómetro. Luego se realizó un gráfico de $m^{1/2}$ en función de d y la constante A se obtuvo a partir de la pendiente de este gráfico. En el inserto de la Fig. 4 se muestra el ajuste realizado para el cálculo de esta constante, para la cual obtuvimos un valor de $0.012 \pm 0.002 \text{ [eV}^{-1/2} * \text{nm}^{-1}]$. En este cálculo la incertidumbre se obtuvo a partir de la composición cuadrática de dos componentes. La primera se corresponde con el ajuste por mínimos cuadrados en el gráfico de $m^{1/2}$ vs d y la segunda con la incertidumbre combinada de m (proveniente del ajuste de la parte lineal de la curva de $(\alpha d)^2$ vs. $\hbar\omega$) y d (tomada como la resolución del perfilómetro).

Luego de obtener la constante A, el valor aproximado del espesor del resto de las muestras se puede calcular de la ecuación (2), sin tener que volver a medir con el perfilómetro. En la Tabla II se muestran los distintos valores de las pendientes y espesores calculados por este método, el valor de la energía del ancho de la banda prohibida, así como las incertidumbres obtenidas para cada caso. En la tabla se aprecia que todas las muestras poseen, aproximadamente, el mismo valor de energía del ancho de la banda prohibida (E_g) y que además este coincide con los valores reportados, por la literatura, para el CdTe. Las incertidumbres relativas de los espesores obtenidos por este método se encuentran dentro del 11 %. Aunque estos valores de incertidumbre son relativamente altos, este procedimiento permite obtener un estimado del espesor de la capa de CdTe, que es un dato importante para la construcción de una celda solar. Es útil usar este método sobre todo si no se tiene un perfilómetro en el laboratorio.

Un aspecto interesante a controlar en la fabricación de la heteroestructura es el espesor de la capa ventana de CdS. Este puede ser determinado mediante el espectro de transmisión antes del crecimiento del CdTe. Resulta interesante conocer su valor después del crecimiento de CdTe pues los procesos de evaporación durante el crecimiento del CdTe y de interdifusión entre ambos materiales pueden afectar el espesor de la capa de CdS.

Como en la interfaz de la capa de CdS y el vidrio los índices de refracción cumplen la relación $n_{\text{vidrio}} < n_{\text{CdS}}$, entonces la condición de máximo que se obtiene es: $2nd = m\lambda$.

Si hacemos incidir el haz de luz por la cara contraria al CdTe (o sea, desde el vidrio), entonces la fracción de luz que se reflejará contendrá la información acerca del espesor de la capa de CdS luego del crecimiento del CdTe y del tratamiento térmico en CdCl₂. Como los índices de refracción cumplen la siguiente relación $n_{\text{vidrio}} < n_{\text{CdS}} < n_{\text{CdTe}}$, la condición de máximo es la misma que en la transmisión para el CdS sobre vidrio.

Tabla I. Características de las muestras de CdTe crecidas sobre CdS a partir de los espectros de transmisión

	m	Espesor (μm)	E_g (eV)
A	587 ± 60	$2,0 \pm 0,4$	1.48 ± 0.21
B	1125 ± 57	$2,8 \pm 0,5$	1.49 ± 0.11
C	1273 ± 12	$2,9 \pm 0,5$	1.48 ± 0.19

En la Fig. 5 se pueden apreciar claramente un máximo y un mínimo en cada curva. Están ligeramente desplazados de una curva a la otra. El máximo en la curva de reflectancia que se encuentra alrededor del 400 nm corresponde con el punto crítico E1 del CdTe y la pequeña ondulación en la misma curva cerca de 520 nm con el ancho de la banda prohibida del CdS. Obsérvese que esta ondulación coincide aproximadamente con el comienzo de la caída abrupta de la transmisión en el espectro de transmisión. Como la condición de máximo es la misma para ambos casos, suponiendo que el índice de refracción no varía considerablemente y que ambos máximos son del mismo orden; entonces podemos plantear la siguiente relación entre las longitudes de ondas correspondientes a estos máximos en los espectros de transmisión, $\lambda(\text{trans})$ y de reflectancia, $\lambda(\text{ref})$ y los espesores antes (d_{antes}) y después ($d_{\text{después}}$) del crecimiento de la capa de CdTe:

$$\frac{\lambda_{\text{máx(trans)}}}{\lambda_{\text{máx(ref)}}} = \frac{d_{\text{antes}}}{d_{\text{después}}} = 1.06$$

Esto confirma una pequeña aunque prácticamente despreciable disminución del espesor de la capa de CdS debida al proceso posterior a su preparación.

DIFRACCIÓN DE RAYOS- X

Las características estructurales de las muestras de CdS/CdTe fueron estudiadas por medio de la difracción de R-x. Los difractogramas fueron realizados en un Difractómetro de polvos Siemens D500 en el Instituto de Investigaciones en Materiales de la Universidad Autónoma de Madrid. En la Fig. 6 se puede apreciar un difractograma típico de una estructura con tratamiento térmico de CdCl₂ de 8 min a 400 °C en la configuración $\theta-2\theta$. Se pueden observar los picos provenientes de las tres capas presentes: ITO, CdS y CdTe. No se observó ningún otro pico adicional que pueda ser debido a alguna fase espúrea. Empleando el método de Scherrer se determinó el tamaño de las

crystalitas tanto para el CdS como para el CdTe. Los resultados son mostrados en la tabla II. No hubo diferencias apreciables para diferentes muestras con este mismo tratamiento.

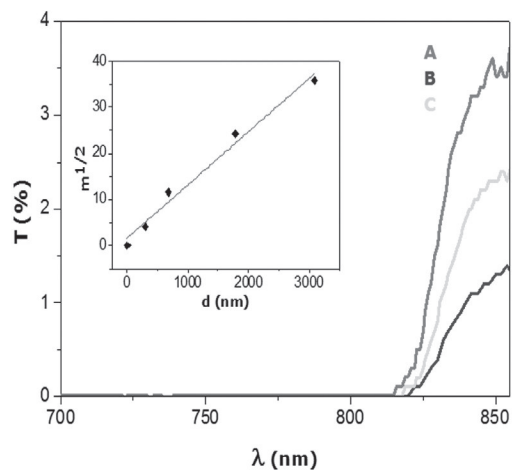


Figura 4: Espectros de transmisión de estructuras de CdS/CdTe con diferentes espesores del CdTe

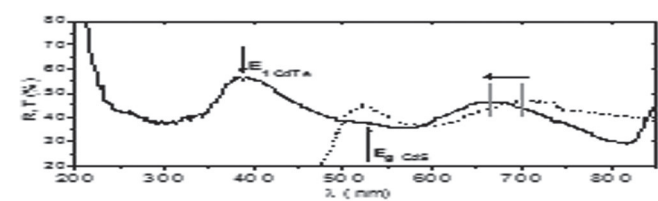


Figura 5: Espectro de transmisión de una muestra de CdS y de reflectancia de la misma muestra haciendo incidir la luz desde el vidrio. Se aprecia un pequeño corrimiento de los máximos y mínimos hacia longitudes de ondas menores luego del crecimiento del CdTe.

Tabla II. Tamaño de cristalita calculado para los diferentes picos en cada caso y los valores promedios obtenidos

Material	Pico	Cristalita (nm)	Cristalita promedio (nm)
CdTe	111	60.02	55.40
	220	52.94	
	311	53.24	
	400	47.19	
	331	54.72	
	422	53.14	
	333	64.46	
	440	53.69	
	531	59.21	
CdS	002	22.69	24.29
	020	25.89	

EFFECTO FOTOVOLTAICO

Para verificar la existencia de efecto fotovoltaico en muestras con CdTe crecido por sublimación isotérmica a corta distan-

cia se prepararon celdas fotovoltaicas usando películas de CdS/ITO/vidrio obtenidas en el departamento de Química- Física de la Universidad de Barcelona obtenidas según ref. [4]. Sobre el CdTe se depositaron contactos de Cu (2 nm) y seguidamente de Ag (200 nm) a través de máscaras de unos 2 mm² por evaporación. Esto fue realizado en la Escuela Superior de Física Matemática del Instituto Politécnico Nacional de México donde también fueron medidas las curvas I-V oscuras e iluminadas de algunas muestras. Otras mediciones de los parámetros fotovoltaicos fueron realizadas en el Instituto de Investigaciones en Materiales de la Universidad Nacional Autónoma de México.

La Fig. 7 muestra las curvas I-V de una estructura. Como se observa las estructuras produjeron efecto fotovoltaico apreciable, aunque lejos de los mejores valores obtenidos en celdas de este tipo. Los principales parámetros obtenidos de estas curvas fueron:

Corriente de Corto Circuito: $I_{sc} \approx 0.153 \text{ mA}$.
 Voltaje a circuito abierto: $V_{oc} \approx 0.420 \text{ volts}$
 Resistencia característica: $R_{CH} \approx 2748.7 \, \Omega$
 Corriente generada por la Luz: $I_l \approx 0.196 \text{ mA}$
 Factor de llenado: $FF \approx 31\%$

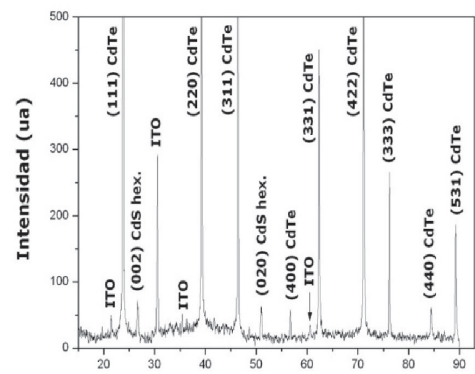


Fig. 6: Difractograma de una estructura de CdS/CdTe

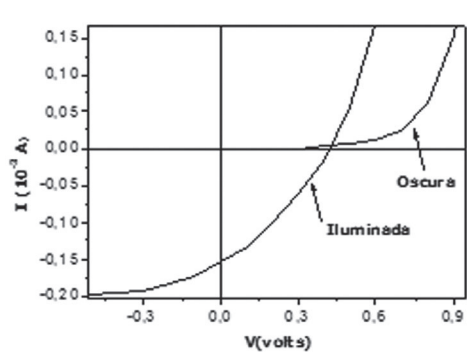


Fig. 7: Curvas IV oscuras e iluminada de una celda solar construida con las estructuras analizadas en este trabajo

CONCLUSIONES

Se obtuvieron heteroestructuras de CdS/CdTe y se fabricaron celdas solares a partir de ellas. La capa de CdTe y también el tratamiento térmico en CdCl₂ fueron realizados usando la sublimación isotérmica a corta distancia, lo cual simplifica de alguna manera el proceso de fabricación de las celdas. Resul-

tados preliminares indican la obtención de efecto fotovoltaico apreciable en las celdas fabricadas de este modo.

AGRADECIMIENTOS

O. de M. agradece la financiación del Programa de intercambio, formación y capacitación de recursos humanos latinoamericanos del Instituto de Ciencia y Tecnología del Distrito Federal (ICyTDF) en colaboración con el Centro Latinoamericano de Física (CLAF).

-
- [1] Arturo Morales-Acevedo, *Solar Energy Mat. & Solar Cells* 90, 2213-2220 (2006)
 - [2] E. Larramendi, E. Purón, L. C. Hernández, M. Sánchez, S. De Roux, O. de Melo, G. Romero- Paredes, R. Peña- Sierra, M. Tamura, *J. Crystal Growth* 223 (2001) 447
 - [3] A. Romeo et al., *Proceedings of the 2nd World Conference and Exhibition on Photovoltaic Solar Energy Conversion*, 6-10 July 1997, Vienna, Austria
 - [4] O. Calzadilla, E. Hernández, E. M. Larramendi, F. Caballero-Briones, M. Zapata-Torres, M. Meléndez-Lira, A. Zapata-Navarro, *Physica Status Solidi (b)* 242 (2005) 1993

TRAPPING, MANIPULATION AND RAPID ROTATION OF NBD-C8 FLUORESCENT SINGLE MICROCRYSTALS IN OPTICAL TWEEZERS

JEAN-PIERRE GALAUP^{a,†}, MARIELA RODRÍGUEZ-OTAZO^{a,b}, ÁNGEL G. AUGIER-CALDERÍN^c, JEAN-FRANÇOIS LAMÈRE^d AND SUZANNE FERY-FORGUES^d

a) Laboratoire Aimé Cotton, Bât.505, Université Paris 11, Orsay, France, jean-pierre.galaup@lac.u-psud.fr

b) Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear, CEADEN; La Habana, Cuba

c) Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, INSTEC; La Habana, Cuba

d) Laboratoire IMRCP, Université Paul Sabatier, Toulouse, France

† autor para la correspondencia

Hemos construido un experimento de pinzas ópticas basado en un microscopio invertido para atrapar y manipular cristales simples de tamaño micro o sub-micrométrico de moléculas fluorescentes de 4-octylamino-7-nitro-benzoxadiazole (Nbd-c8). Estos cristales simples tienen formas de paralelepípedo y exhiben propiedades de birrefringencia evidenciadas con experimentos ópticos entre polarizadores cruzados en un microscopio polarizante. Los cristales son uniaxiales con su eje óptico orientado a lo largo de su dimensión mayor. Atrapados en la trampa óptica, se orientan los micro-cristales orgánicos de una manera tal que su eje largo esté en la dirección de la propagación del haz, y su eje corto siga la dirección de la polarización lineal. Por lo tanto, con la luz linealmente polarizada, simplemente rotando la luz polarizada se puede orientar el cristal. Al usar luz circularmente o solo elípticamente polarizada, el cristal puede rotar y alcanzar espontáneamente una velocidad de rotación de varios centenares de vueltas por segundo. Se ha observado un resultado sorprendente: cuando la potencia incidente está creciendo, la velocidad de rotación aumenta hasta alcanzar un valor máximo y después disminuye incluso cuando la potencia todavía está aumentando. Por otra parte, esta evolución es irreversible. Diversas explicaciones posibles pueden ser consideradas. El desarrollo de un control 3D de los cristales por la holografía dinámica, empleando moduladores espaciales cristalinos líquidos será presentado y discutido en base de los resultados más recientes obtenidos.

We have built an optical tweezers experiment based on an inverted microscope to trap and manipulate single crystals of micro or sub-micrometer size made from fluorescent molecules of 4-octylamino-7-nitro-benzoxadiazole (NBD-C8). These single crystals have parallelepiped shapes and exhibit birefringence properties evidenced through optical experiments between crossed polarizers in a polarizing microscope. The crystals are uniaxial with their optical axis oriented along their largest dimension. Trapped in the optical trap, the organic micro-crystals are oriented in such a way that their long axis is along the direction of the beam propagation, and their short axis follows the direction of the linear polarization. Therefore, with linearly polarized light, simply rotating the light polarization can orient the crystal. When using circularly or only elliptically polarized light, the crystal can spontaneously rotate and reach rotation speed of several hundreds of turns per second. A surprising result has been observed: when the incident power is growing up, the rotation speed increases to reach a maximum value and then decreases even when the power is still growing up. Moreover, this evolution is irreversible. Different possible explanations can be considered. The development of a 3D control of the crystals by dynamical holography using liquid crystal spatial modulators will be presented and discussed on the basis of the most recent results obtained.

Palabras Claves. Beam trapping, 42.65.Jx. Optical instruments and equipments, 07.60.-j. Optical elements, devices, and systems, 42.79.-e. Radiation effects on specific materials, 61.82.-d.

INTRODUCTION

Since the seminal paper and subsequent contributions of Ashkin [1,2], a huge number of publications have been written about optical tweezers [3]. Many fields of applications have been developed in biology and medicine, as well as in chemistry, microfluidics and nanosciences. Actually, optical tweezers are presently one of the most powerful tools to maintain and control small particles without any mechanical or invasive manipulation. They can be applied to a wide variety of objects whose size is in the micrometer scale, or much below.

They are produced by a laser beam, which is focused through a high-numerical aperture microscope objective in a micro-sized spot. Scattering and gradient forces are used for trapping and moving nano- or micrometer sized particles. However, predicting how non-spherical micro-objects behave when grabbed by optical tweezers is difficult. There is a need for systematic investigations carried out on objects with well defined shape and size. Micro-crystals offer an interesting alternative for studying the orientation effects in the laser beam.

Few crystals were already studied including tetra-gonal lysozyme crystals [4], organic semiconductor perylenetetracarboxylic dianhydride platelets [5], cubic NaCl crystals [6], roughly spherical calcite crystals [7,8], and irregular crystals made of quartz [9].

In the following work, we were interested in micro-crystals of an organic dye, more exactly 4-n-octylamino-7-nitro-benzoxadiazole (1), which belongs to a well-known family of fluorescent probes. Micro-crystals were prepared by a solvent-exchange method [10] and obtained as a suspension in aqueous medium. This procedure is easy to implement, leads to reproducible samples and is particularly versatile.

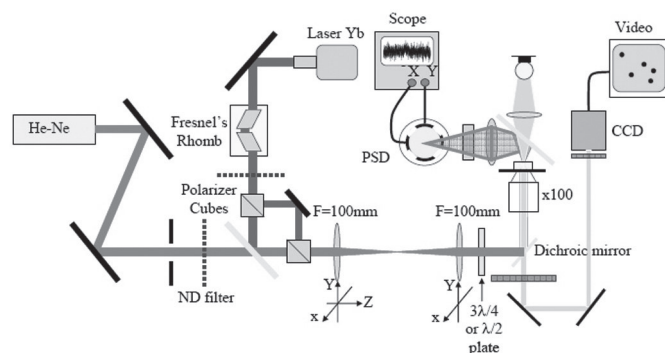


Figure 1: Scheme of the experimental set-up.

Actually, the shape and size of the micro-crystals can be controlled by placing additives, such as macro-molecules, in the crystallization medium [11-14]. A large variety of micro-crystals of this type can thus be obtained [15]. In the present case, regular parallelepiped micro-crystals were generated and their behavior was studied with optical tweezers.

Fig. 1 shows the experimental set-up used in this work, which is a conventional one, fully described elsewhere [16]. The trapping laser source is an Yb-doped fiber laser from IPG, working at $1,064 \mu\text{m}$ and delivering 1W at maximum power. This laser generated a high quality TEM₀₀ mode, linearly polarized.

The set-up was improved for the generation of two traps by the use of two polarizing cubes as beam-splitters. For detecting and measuring fluctuations in the position of the trapped crystals, a 10 mW HeNe laser, made perfectly collinear with the IR trapping beam was used.

An optical system records the light scattered by the crystal on a Position Sensor Detector (PSD).

RESULTS AND DISCUSSION

Although the crystal structure of (1) is still unknown, there is no doubt about the crystalline nature of the micro-objects. In the experimental conditions used for their preparation, a large majority of them are of parallelepiped shape. Their observation between crossed polarizers indicated that they were single birefringent crystals with neutral lines oriented along their long and short axis. They also were uniaxial with the optical

axis oriented along the long axis of the crystals, as proven by the observation of a black cross when observing the crystals with converging light oriented parallel to the optical axis.

Orientation effects with linearly polarized light. The crystals were easily captured in the optical trap, even in the case of the largest ones. On the whole, the crystals trapped in linearly polarized light were directed in the same way, i.e. with their long z-axis lying in the direction of light propagation. Thus, in practice, we observed the face of the crystal that was directed perpendicularly to the z-axis. This result agrees well with that reported for micro-cylinders, the long axis of which is oriented in the direction of the beam [17]. In the most frequent situation where the long axis is parallel to the direction of the beam, the orientation of the x- and y-axes of the crystal was directly controlled by the state of polarization of light. To do so, a $\lambda/2$ crystalline quartz plate was placed before the objective as shown in Fig.1. By rotating the $\lambda/2$ plate, the direction of vibration of the electric field was varied and therefore the crystal was constantly re-oriented. For any rotation of the $\lambda/2$ plate by an angle θ , the direction of polarization turns by an angle 2θ , as exactly does the crystal shown in Fig. 2.

The observation of the angular alignment of birefringent micro-objects in the presence of linearly polarized light has indeed been reported [18, 19]. However, this explanation is not valid in our case. In fact, being oriented with their optical axis along the beam propagation, the crystals appear isotropic. A different explanation must be looked for, based on their parallelepiped shape.

Optical torque induced by circularly or elliptically polarized light. In some experimental conditions, the crystals were put in rotation with quite a high number of revolutions per second. To do so, the $\lambda/2$ retardation plate was replaced by a $3\lambda/4$ plate, thus generating a circularly or elliptically polarized beam. The direction of rotation depends on the angle chosen for the crystalline plate. Indeed, according to the orientation of the axes of the $3\lambda/4$ plate with respect to the direction of linear polarization of the incoming beam, a right or left circularly or elliptically polarized wave was created and a transfer of the angular momentum of the laser beam could take place. The signal associated with the rapid rotation of a crystal under high incident laser power is displayed in Fig. 3a. This signal does not correspond to a pure sinusoid. Nevertheless, the value of the rotational frequency was easily extracted from its periodicity. Fig. 3b shows the corresponding Fourier transform spectrum in which a neat peak appears at 317 Hz.

Owing to the symmetric shape of the micro-crystals, the peak displayed by the Fourier's spectrum is centered on a frequency value that is twice the number of crystal revolutions per second. Therefore, in the example of Fig. 3, the crystal is rotating at approximately 150-160 turns/s. For some crystals, these frequencies were up to 1 kHz, which means that the number of crystal revolutions per unit of time could reach 500 turns/s.

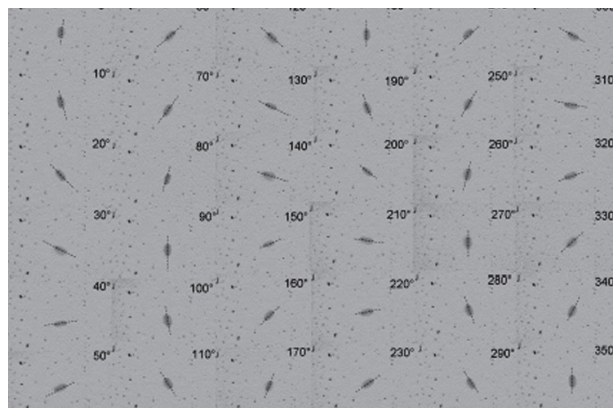


Figura 2: From top to bottom and left to right: Optical micro-scropy images showing the orientation of a micro-crystal upon rotation of the linear polarization of the trapping beam. The ro-tation angle of the $\lambda/2$ retardation plate is indicated.

To our knowledge, it is the first time that such a high ro-tation speed only induced by light is reported for objects of the size of our micro-crystals. The curve of Fig. 4 shows the evolution of the rotational speed when the incident power is growing up. A strange behavior was observed. As the incidental power continued growing up, the rotational speed reached a maximum value, and then began to decrease. The most in-triguing fact remains the irreversible character of this evolution. Indeed, reducing the laser power did not induce the micro-crystal to turn more rapidly again.

A crude model taking into account a movement of pre-cession and damping forces due to fluid viscosity can predict a parabolic evolution. Nevertheless, more effort is still needed for a better understanding of this behavior. The question of the irreversibility is indeed a most in-tri-guing point.

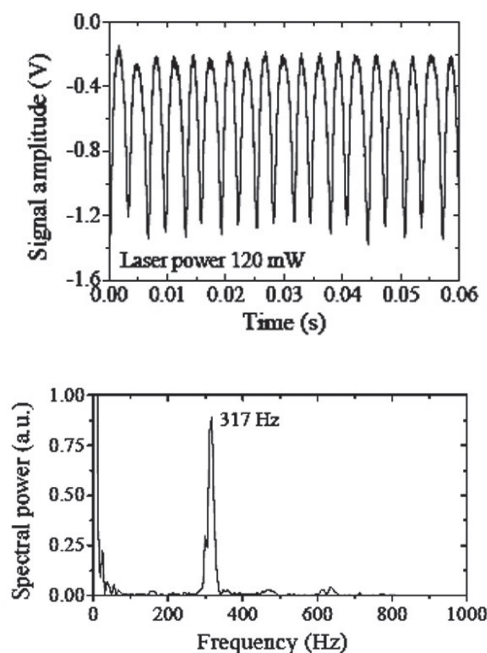


Figura 3: (a) Rotation signal for a micro-crystal under a laser power of 120 mW measured at the laser output and (b) its Fourier transform.

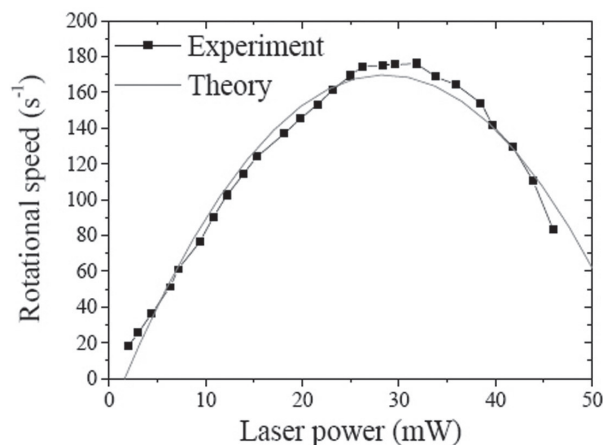


Figura 4: Variation of the rotational speed of a micro-crystal with monotonous increase of the laser power measured near the front focal plane of the objective. Points are experimental. The fitting curve in red is based on a crude model developed in [20].

CONCLUSION AND PERSPECTIVES

Dye micro-crystals used have proved to be interesting tools to study the behavior of non-spherical par-ticles with optical tweezers. The most remarkable fact is the high rotational speed reached by the crystals. If keeping the laser power below a critical threshold, the speed is proportional to the incidental power. Micro-crystals or similar objects could then be used as stirrers in microfluidic devices. Finally, the in-tri-guing behavior observed at high laser power attracts attention on phenomena that are still badly known but could play a significant role in the fields of micro-fluidics and optical tweezers. An interesting perspec-tive also emerges for the 3D manipulation and control of non spherical objects using holographic tweezers ow-ing to the use of liquid crystal spatial light modula-tors. In preliminary experiments, we have shown that it was possible to manipulate and orient one crystal by generating multiple optical traps (typically 4 traps were created). A challenging perspective will be to achieve such a control with only one laser beam, spatially structured by dynamic holograms in form of Laguerre-Gauss beams or more complicated spatial shapes.

- [1] A. Ashkin, "Acceleration and trapping of particles by radiation pressure," *Phys. Rev. Lett.* 24, 156-159 (1970).
- [2] A. Ashkin, "History of optical trapping and manipulation of small neutral particles, atoms and molecules in Single Molecule Spectroscopy, R. Rigler, M. Orrit, and T. Basché, eds. (Springer Ser. Chem. Phys. 2001), pp. 1-31.
- [3] M. J. Lang, and S. M. Block, "Resource letter: LBOT-1: Laser based optical tweezers," *Am. J. Phys.* 71, 201-215 (2003).
- [4] W. Singer, T. A. Nieminen, U. J. Gibson, N. R. Heckenberg, and H. Rubinsztein-Dunlop, "Orientation of optically trapped nonspherical birefringent particles," *Phys. Rev. E* 73, 021911 (2006).
- [5] C. Starr, W. Dultz, H. P. Wagner, K. Dholakia, and H. Schmitzer, "Optically controlled rotation of PTCDA crystals in optical tweezers," *AIP Conference proceedings* 772, 1099-1100 (2005).
- [6] U. Gibson, W. Singer, T. Nieminen, N. Heckenberg, and H. Rubinsztein-Dunlop, "Growth of crystals in optical tweezers," in *Optical Trapping and Optical Micromanipulation II*, K. Dholakia, and G. C. Spalding, eds., *Proc. SPIE* 5930, 294-302, (2005).
- [7] M. E. J. Friese, T. A. Nieminen, N. R. Heckenberg, and H. Rubinsztein-Dunlop, "Optical alignment and spinning of laser-trapped microscopic particles," *Nature* 394, 348-350 (1998); Erratum: *Nature* 395, 621 (1998).
- [8] A. T. O'Neil, and M. J. Padgett, "Rotational control within optical tweezers by use of a rotating aperture," *Opt. Lett.* 27, 743-745 (2002).

- [9] A. La Porta, and M. Wang, "Optical torque wrench: angular trapping, rotation, and torque detection of quartz microparticles," *Phys. Rev. Lett.* 92, 190801 (2004).
- [10] H. Nakanishi, and H. Oikawa, "Reprecipitation method for organic nanocrystals, in *Single Organic Nanoparticles*, H. Masuhara, H. Nakanishi, and K. Sasaki, eds. (Springer Verlag, Berlin, 2003), pp. 17-31.
- [11] F. Bertorelle, D. Lavabre, and S. Fery-Forgues, "Dendrimer-tuned formation of luminescent organic micro-crystals," *J. Am. Chem. Soc.* 125, 6244, (2003).
- [12] F. Bertorelle, F. Rodrigues, and S. Fery-Forgues, "Dendrimer-tuned formation of fluorescent organic micro-crystals. Influence of dye hydrophobicity and dendrimer charge," *Langmuir* 22, 8523-8531 (2006).
- [13] M. Abyan, F. Bertorelle, and S. Fery-Forgues, "Use of linear polymers to control the preparation of luminescent organic microcrystals," *Langmuir* 21, 6030-6037 (2005).
- [14] L. Birl, F. Bertorelle, F. Rodrigues, S. Badré, R. Pansu, and S. Fery-Forgues, "Effect of DNA on the growth and optical properties of luminescent organic microcrystals," *Langmuir* 22, 6256-6265 (2006).
- [15] M. Abyan, D. de Caro, and S. Fery-Forgues, "Suspensions of organic microcrystals produced in the presence of polymers: Diversity of UV/vis absorption and fluorescence properties according to the preparation conditions," *Langmuir* 25, 1651-1658 (2009).
- [16] M. Rodriguez-Otazo, "Réalisation de pinces optiques pour la manipulation de nano et micro objets individuels d'intérêt chimique ou biologique," PhD thesis, Université de Paris 11, 2008 (in French).
- [17] R. C. Gauthier, M. Ashman, and C. P. Grower, "Experimental confirmation of the optical-trapping properties of cylindrical objects," *Appl. Opt.* 38, 4861-4869 (1999).
- [18] E. Higurashi, R. Sawada, and T. Ito, "Optically induced angular alignment of trapped birefringent micro-objects by linearly polarized light," *Phys. Rev. E* 59, 3676-3681 (1999).
- [19] E. Higurashi, R. Sawada, and T. Ito, "Optically induced angular alignment of birefringent micro-objects by linear polarization," *Appl. Phys. Lett.* 73, 3034-3036 (1998).
- [20] M. Rodriguez-Otazo, A. Augier-Calderín, J.-P. Galaup, J.-F. Lamère, and S. Fery-Forgues, "High rotation speed of single molecular crystals in an optical trap with elliptically polarized light," *Appl. Opt.* 48, 2720-2730 (2009).

EMPLEO DE LA MULTIMEDIA “ELECTROMAGNETISMO” EN EL INSTITUTO SUPERIOR POLITÉCNICO DE HUAMBO

SANTIAGO GARCÍA DALLY^{ab}, FÉLIX MARTÍNEZ OLIVA^a, JUAN CRUZ ARENCIBIA^{bc}, ERNANI MANUEL ALMEIDA MORGUIER^c,
ESTER TERESA NAZARETH DIAS^c

a. Departamento de Física Aplicada, Facultad de Física, Universidad de la Habana, 10400 Habana, Cuba; fmartinez@fisica.uh.cu

b. Departamento de Física, CUJAE, Cuba.

c. Departamento de Ingeniería, Instituto Superior Politécnico de Huambo, R. P. De Angola.

Dentro del conjunto de países en los que Cuba ha mantenido y mantiene una colaboración en diversas áreas y, muy en particular, la de educación, se encuentra la República de Angola. En el presente trabajo se muestra la experiencia del colectivo de autores en la elaboración y aplicación de una multimedia en idioma portugués correspondiente a la asignatura *Electromagnetismo* que tratará de resolver, en cierta medida, la carencia de libros de texto, material de laboratorio y dificultades de formación presentadas por los estudiantes del Instituto Superior Politécnico de la provincia de Huambo, República de Angola.

Amongst the various countries where Cuba has maintained systematic cooperation in different areas –in particular, Education– there is the Republic of Angola. In this work we show our experience in the elaboration and application of a Multimedia in Portuguese dealing with the subject of Electromagnetism. It tries to solve, to some extent, the lack of appropriate textbooks, laboratory materials and other difficulties that suffers the Higher Polytechnical Institute of the Huambo province, Republic of Angola.

Palabras Clave. Multimedia, República de Angola, Laboratorios, Libros de texto.

INTRODUCCIÓN

Enmarcada en la ciudad de Huambo, capital de la provincia del mismo nombre, y perteneciente a la República de Angola, se encuentra el Instituto Superior Tecnológico al que se hace referencia en este trabajo. El mismo mejoró significativamente sus actividades docentes en el 2009 con la llegada de un grupo de colaboradores cubanos, los cuales desde sus inicios tuvieron que realizar un intenso trabajo metodológico con vistas a disminuir las dificultades docentes que presentaban los estudiantes de las carreras de Licenciatura en Ingeniería Informática, y Licenciatura en Ingeniería Electrónica y Telecomunicaciones.

Es ampliamente conocido que el tránsito de la enseñanza media a la superior entraña un salto cuantitativo y cualitativo en el nivel de conocimientos que deben alcanzar los estudiantes. Este salto tiene un carácter universal, pues se pone de manifiesto incluso, con independencia del nivel de desarrollo económico y del sistema educacional de cada país [1], siendo bien significativo en el caso de la República de Angola en general, y en lo particular de una provincia a otra del país. Entre los problemas generales existentes en el país que afectan la educación superior, tenemos:

- a) Alta inestabilidad social debido a las decenas de años de guerra
- b) Alto índice de analfabetismo y carencia de personal calificado que permita llevar a cabo la política educacional propuesta por el estado

c) Proliferación de la enseñanza de tipo mecanicista (memorística) en las ciencias básicas, fundamentalmente la matemática y la física, provocando un insuficiente desarrollo del pensamiento lógico en muchos estudiantes.

d) Estudiantes con una amplia gama de edades, muchos de ellos trabajadores y padres de familia que estuvieron desvinculados de la escuela durante varios años

Mientras que en lo particular se pueden mencionar:

- a) Alrededor del 37% de los estudiantes son madres, algunas de las cuales tienen 3 y 4 hijos
- b) Más del 60% de los estudiantes son trabajadores y no todos gozan de facilidades para estudiar
- c) Más del 50% de los estudiantes no han tenido acceso a los medios informáticos
- d) Amplias dificultades para realizar las operaciones matemáticas elementales de forma manual, dependiendo en gran medida de la calculadora
- e) Notable falta de habilidad para interpretar el texto de los ejercicios que se les plantean

f) Incapacidad para comprender una secuencia lógica de operaciones matemáticas

g) Incapacidad de interpretar un gráfico a partir de las variables que éste relaciona

h) Carencia total de libros de textos y material de laboratorio para la realización de prácticas y demostraciones

Tomando en cuenta los avances alcanzados en el trabajo metodológico desarrollado por las diferentes disciplinas durante el primer semestre del curso académico 2009–2010 en el Instituto Superior Politécnico de Huambo, y en particular, en el caso de la Física, y las ventajas que presenta la inserción en el proceso docente-educativo de un producto multimedia [2,3], así como la experiencia adquirida y resultados alcanzados en la elaboración y aplicación en la docencia de un producto similar [4,5], se propone la elaboración y aplicación de una multimedia en idioma portugués correspondiente a la asignatura Electromagnetismo.

La multimedia propuesta tratara de resolver en gran medida la carencia de libros de texto, material de laboratorio y otras dificultades presentadas por los estudiantes del Instituto.

DESARROLLO

Dentro del conjunto de aplicaciones de las NTIC (Nuevas Tecnologías de la Informática y Comunicación) en la enseñanza de la Física, se encuentra el empleo de las multimedia como parte del proceso docente, especialmente si se tienen dificultades como las antes mencionadas. Algunas de sus ventajas, son:

Lo intrínsecamente motivante de este producto para los estudiantes.

El disponer de un conjunto de dos laboratorios de informática con 16 máquinas computadoras cada uno, lo cual permitió crear un acceso directo a la página de presentación en cada una de ellas.

En la página de presentación, tal y como se muestra en la figura 1, se encuentran detallados mediante botones los temas que abarca la asignatura de “Electromagnetismo” en las dos carreras que se estudian en el ISPH



Figura 1: Imagen del menú principal. En esta página de presentación el estudiante, al hacer “click” con el mouse sobre el tema deseado, se le muestra un menú donde se relacionan los distintos aspectos que puede revisar de acuerdo a su interés.

La opción “Perguntas” del menú principal consta de aproximadamente 11 preguntas de selección múltiple. En cada una de ellas, los aciertos y desaciertos cometidos por el estudiante al seleccionar son registrados en la columna de la izquierda en las secciones nombradas “Bem” o “Mal” que muestra la figura 2. Es de señalar que en cada una de las variantes de posibles respuestas que se presentan en cada pregunta, el estudiante, al realizar su selección, recibe una sugerencia y/o indicación. Al finalizar el conjunto de preguntas y acorde con el número de respuestas correctas seleccionadas, el estudiante recibe una calificación entre 0 y 20 puntos, la cual se corresponde con la escala de valores empleada en los centros educacionales de la República de Angola.

En la columna de la izquierda de esta opción aparecen un conjunto de botones que le permiten al estudiante revisar, en el momento que lo desee, otro aspecto del tema elegido sin acudir al menú principal. Por otra parte, si el estudiante desea otro tema del programa de la asignatura o simplemente abandonar el trabajo, puede hacer uso de los botones mostrados en la figura 2, justo debajo del botón “Mal”.

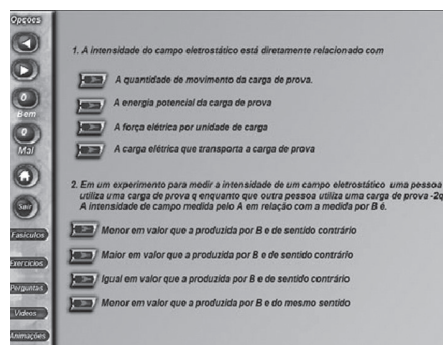


Figura 2: Primera página de la opción “Perguntas” de campo electrostático

La opción “Exercícios” cuya primera página se muestra en la figura 3, le brinda al estudiante una gama de ejercicios resueltos y propuestos del tema que haya seleccionado.

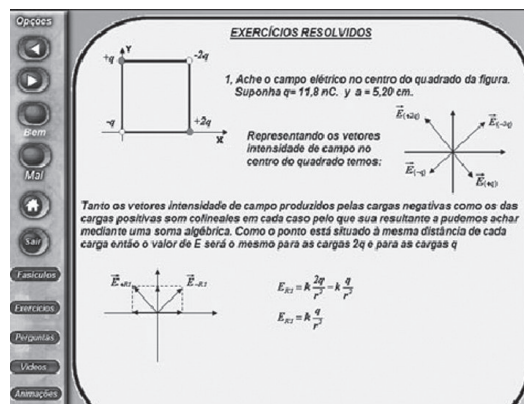


Figura 3: Primera página de la opción “Exercícios” de campo electrostático

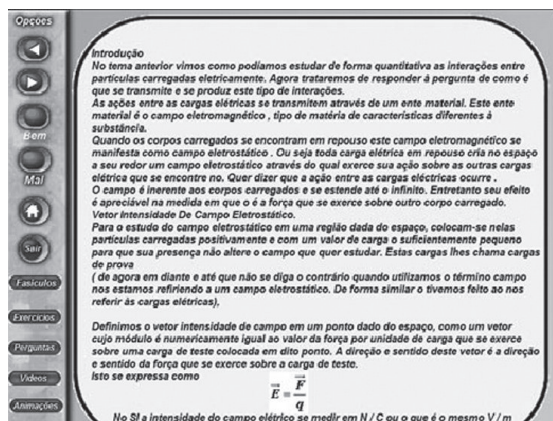


Figura 4: Primera página de la opción “Fascículos” de campo electrostático

La opción “Fascículos” cuya primera página se muestra en la figura 4, le brinda al estudiante los contenidos referentes al tema de su elección, dando solución a la necesidad de un texto por el que el estudiante puede realizar su estudio independiente, consolidando los conceptos dados en las conferencias de la asignatura. En la opciones correspondientes a “Videos” (figura 5) y “Animações” se realiza una sinopsis de lo que se trata en los mismos, excepto en aquellos en que transcurren mediante una narración. La mayoría de las mismos son empleados en el durante las conferencias correspondientes a sus respectivos temas.

La opción “Laboratorios” nos permite, al menos de forma virtual, realizar algunas prácticas simples, y con ello paliar la carencia de medios para realizar esta actividad directamente con los estudiantes. Debe señalarse que aquí los estudiantes pueden ver a través de los “applets” una aplicación de lo recibido en la asignatura “Programación Orientada a Objetos”.

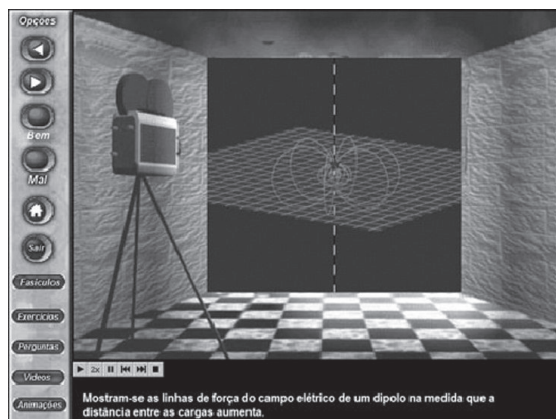


Figura 5: Primera página de la opción “Videos” de campo electrostático

CONCLUSIONES

La aplicación de la multimedia “Electromagnetismo” en el instituto superior politécnico de Huambo ha dado, en gran medida, solución a las necesidades actuales de los estudiantes de esta institución. Esta multimedia no constituye una solución final al problema, sino un medio de enseñanza que en manos del docente constituye un buen apoyo a la docencia de la asignatura “Electromagnetismo”. La misma, por sus características, puede aplicarse en otros centros de educación superior de la República de Angola o de habla portuguesa.

- [1] P.G. Moundy, “Revolution in Teaching” Editorial Grazia and sons. Parma, Italia, 2002.
- [2] R. A. C. González, El Desarrollo De La Actividad Experimental En Física General y El Uso De Las Tics En Las Prácticas De Laboratorio., Revista Pedagogía Universitaria Vol. XII No. 5, 2007
- [3] F.J. Marcos, E.R.Bouchet, O.E.DiLissa, C.E.Freyre, D.E.Martinez, D.M. Berman, Modelización Computarizada De Sistemas Físicos. Su Incidencia En el Proceso Educativo, Ciencia, Docencia y Tecnología, Vol XVI # 030, PP 157-178, Universidad Nacional Entre Ríos, Argentina, 2005.
- [4] S. García, “Una experiencia docente en la impartición de la mecánica a estudiantes de Biología”. Libro de Actas. I Taller Latinoamericano de Enseñanza de la Física. Servicio de publicaciones de la Universidad de Córdoba. Imprenta Comercial Motril. Granada, España, 1999.
- [5] “Álgebra Vectorial y Cinemática de a Partícula; Programa Multimedia Para el Trabajo Independiente”. Proceeding del III Congreso Internacional Didáctica de las Ciencias. VIII Taller Internacional Sobre Enseñanza de la Física” ISBN 959-7113-12-0 Febrero 2004.

NEW-CONCEPT NANOSTRUCTURED SOLAR CELLS

E. VIGIL^{a,b}

a) Facultad de Física, Univ. de La Habana, Ciudad de La Habana 10 400, Cuba. evigil@fisica.uh.cu

b) Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE-UH)

Nuevos tipos de celdas solares, basadas en materiales nanoestructurados, son estudiadas intensamente en la actualidad debido a sus grandes perspectivas y novedoso principio de funcionamiento; el cual se debe esencialmente a la dimensión de las partículas en los nanomateriales utilizados. Eficiencias relativamente altas han sido obtenidas utilizando tecnologías que no emplean altas temperaturas y materiales que no requieren un alto grado de pureza., por lo que su bajo costo constituye un importante incentivo. Estos novedosos dispositivos fotovoltaicos se encuentran en evolución a partir de las celdas solares sensibilizadas (DSSC) buscándose un mejor comportamiento y características superiores, en particular, el tiempo de vida de las mismas. Se describen estas celdas solares así como su principio de funcionamiento basando el análisis en las más estudiadas, aunque aún no completamente explicadas, DSSC. Se examinan las implicaciones de la nanoestructura tridimensional en estos dispositivos. Unido al análisis de las tendencias de las investigaciones, se revisan los diferentes tipos de celdas solares sólidas cuyo principio de funcionamiento se basa en su nanoestructura tridimensional.

New types of solar cells based on nanostructured materials are intensively studied because of their prospective applications and interesting new working principle – essentially due to the particle size of nanomaterials used. Relatively high efficiencies have been obtained using low-temperature technology and materials that do not require high purity; therefore, their low cost represents an important incentive. Novel type photovoltaic devices have evolved from dye sensitized solar cells (DSSC) in the quest to improve their behavior and characteristics, particularly their lifetime. These solar cells are described and their working principle, not completely clear so far, is explained using the better known DSSC. An analysis is made of the implications of having a nano-sized three-dimensional structure in these solar cells. Different solid sensitized solar cells are briefly reviewed as well as actual and foreseeable research trends.

Palabras Clave. photovoltaic solar cells 88.40jr, nanomaterials 81.07.Bc

INTRODUCTION

Humanity faces a highly dangerous environmental crisis caused mainly by the employment of fossil fuels which are responsible for contamination in cities, acid rains and global warming accompanied by all its known devastating effects [1].

At the same time, a fuel crisis must occur in the not so distant future. According to the International Energy Agency (IEA) for almost 30 years oil new discoveries have been less than annual consumption [2]. Some predictions say we have already reached maximum possible yearly extraction (peak-oil) and a great majority says it will be reached before 2020 [3]. At the present moment, 85% of the energy used by the total population comes from fossil fuels: oil 34.6%, gas 23.4% and coal 27.6% [4]. Natural gas and coal will also peak, though later, especially coal - which is much more contaminant than oil.

It is urgent to develop a new energy infrastructure to avoid an environmental crisis and a fuel crisis. Sources for nuclear energy production are non-renewable and also contaminant. Renewable sources of energies like hydro, eolic, geothermal, solar, etc are not only renewable but affect the environment to a much lesser extent. Until recently, practically only hydro could compete in price with fossil fuels. Today

the situation is changing in spite that funds for renewable sources research have been insufficient and much less than those devoted to fossil fuels or nuclear energy [5]. Electricity coming from eolic or photovoltaic energy shows a very rapid growth. Photovoltaic is the fastest growing renewable energy market, specially its “grid-connected” application [6]. Direct solar energy conversion to heat also shows a significant increment in certain regions. Among all renewable energy sources, solar energy has by far the greatest potential and the wider distribution in the Planet. It is much larger than the present energy consumption and capable of covering future demands of world population [7]. Electricity coming from photovoltaic energy could also substitute needs of fuels for transportation if used to obtain hydrogen. One must conclude that it is urgent and highly convenient to develop photovoltaic energy.

Solar cells are the heart of photovoltaic systems. Interest in solar cells for terrestrial uses rouse because of the first oil crisis in the 70's. Initial developments and applications were based on silicon solar cells which benefited from the microelectronic industry. Highly efficient AlGaAs solar cells developed for space applications were demonstrated for the

first time for terrestrial applications in 1981 using solar light concentrators at Ioffe Institute [8]. Solar cells that absorb the light more effectively allowing the use of thin films were also developed, though not as successfully as silicon solar cells. CdTe thin film solar cell with 6% efficiency was reported as early as 1966 [9]. In 1985, M. Green at the University of New South Wales, Australia, broke the 20% efficiency barrier for silicon solar cells under one sun; after developing one year earlier with S. Wenham the *LGBC* solar cell (laser-grooved buried-contact) [10].

In 1991 M. Grätzel and collaborators report the dye-sensitized photoelectrochemical solar cell (DSSC) [11] and in 1996 more than 10% efficiency is achieved [12]. The main advantage of the DSSC is its low cost together with a higher than 10% efficiency. Unfortunately, life-time is its Achilles' heel. This low cost is determined essentially by its different working principle. Because of it, they do not require high purity materials or highly cleaned rooms for their fabrication. Rather simple technologies can be used at room temperature or not very high temperature. This means less expensive technological equipments and much less energy used in their fabrication. It must be mentioned that their flexible options imply less weight, widening the range of possible uses. DSSC appearance and possible colors favor architectural and other applications where besides producing electricity, expensive decorative materials are substituted. Even though the use of photovoltaic energy is probably the most environmental-friendly form of renewable energy, materials and reagents used in their fabrication could have a small (though avoidable) contaminant effect. This could also be true when solar panels become old and have to be discarded (also avoidable through recycling). DSSC are the less contaminant of all different types of solar cells because they are based on innocuous materials.

Feltrin and Freundlich [13] estimate energy production limits for several mature photovoltaic technologies based on available global material reserves. DSSC stand out in that material shortages would not prevent their scale-up even to the terawatt range if the Sn conducting oxide contact is substituted.

Finally, regarding future market projection W. Hoffmann [14], president of the European Photovoltaic Industry Association (EPIA), predicts that by 2030 DSSC and "new concepts" solar cells production will surpass crystalline silicon (mono- and poly-) production.

DYE SENSITIZED SOLAR CELLS

To understand advantages of using nanostructured materials in solar cells, it is convenient to know how dye sensitized solar cells work (DSSC, also sometimes called Grätzel's cells or DSC).

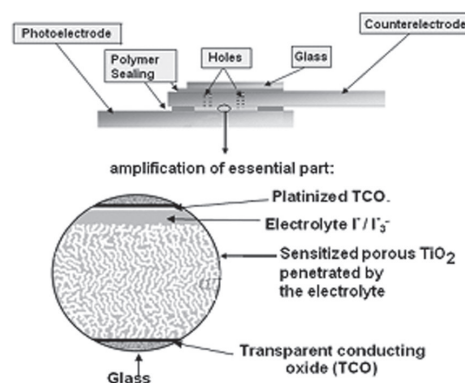


Figura 1: Component parts of a DSSC. The two electrodes are fixed together by the sealant that serves to contain the electrolyte and to avoid contact of the counter electrode with the TiO₂.

A DSSC consists of the following essential parts: the photoelectrode formed by the electron-extracting electrode plus the dye-sensitized, mesoporous, nanocrystalline TiO₂ penetrated by the electrolyte; and the counter electrode. These are shown in Fig. 1 that also shows

The electron-extracting electrode is usually a transparent conducting oxide (TCO) on glass in order to allow light penetration from that side. Surface resistivity of TCO used is between 8-15 Ω /square. The conducting oxide more frequently used is SnO₂:F (known as FTO) [15]. It behaves better than ITO (In₂O₃:Sn) whose conductivity decreases significantly during the thermal treatment of TiO₂ film at ca. 500°C. FTO is known to be thermally stable above this temperature. Studies are conducted to employ other substrates; especially for using high-throughput industrial roll-to-roll production of large area, flexible DSSC. Research includes conducting transparent plastic sheets [16], as well as non-transparent metallic foils with light penetrating from the other side [17].

TiO₂ is the mesoporous, nanocrystalline, wide bandgap metal oxide used in DSSC for best results (nanocrystalline anatase, bandgap $E_g = 3.2$ eV). The TiO₂ layer thickness is typically between 5-15 μ m and nanoparticles average size ranges from 15-30nm [18]. The porosity is approximately 50% [19], which together with particle size give rise to a real area or roughness factor of approximately 100-fold area enhancement per μ m. This is very important to increase light absorption by the dye monolayer attached to the TiO₂ but also in determining a different working principle. There has been interest in replacing TiO₂ with other metal oxides such as SnO₂ [20] [21], SrTiO₃ [22] and ZnO [23], [24].

Dyes or sensitizers are chemisorbed onto the surface of the TiO₂. Sensitizers that have given best results so far are ruthenium bipyridyl complex with the general formula RuL_xL'_ySCN_z, where L and L' are polypyridyl ligands. The 3 more frequently used complexes are known by their commercial names: red dye N-3, black dye N-749 and Z-907. The last two absorb a wider spectral range than the red dye N-3. Efforts have been made to find alternative less expensive sensitizing compounds. Na-

tural dyes have been studied [25], as well as sensitizers based on metal-free organic dyes [26]-[28]. Research reports on sensitizers are very abundant in the literature. Different goals have been and are being pursued as: improved molar absorption coefficients; longer-term stability; extension of the spectral absorption range; and sensitizers with different colors for special applications. It has also been reported [29] that the dye plays an important secondary role in passivating the semiconductor oxide surface and inhibiting the recombination with acceptors. The suitability of ruthenium bipyridyl complex then depends on both: the ligand and the nature of the oxide (TiO_2).

The electrolyte plays an essential role in DSSC [30]. The electrolyte typically used consists of the redox pair iodide-triiodide (I^-/I_3^-) dissolved in an organic solvent. No other redox pair has been found to give higher efficiencies than I^-/I_3^- even though there have been efforts to find less corrosive redox pairs, with lower light absorption and a more convenient redox potential energy [31], [32]. DSSC with highest efficiency employ a low-viscosity solvent, usually acetonitrile; but these electrolytes are not appropriate for achieving the best long-term stability characteristics, especially for outdoors. There are several reports regarding liquid electrolytes for DSSC [33]-[35] though there is no optimum solution. Solvent-free DSSC constitute an important direction of research and different solutions are studied for replacing the volatile liquid electrolyte with solid or quasi-solid hole conductors, such as p-type semiconductors, ionic liquid electrolyte and polymer electrolyte. It must be mentioned that in order to increase efficiency, liquid electrolytes also contain additives such as 4-tert-butylpyridine (TBP) or N-methylbenzimidazole (NMBI) [36] although their exact mechanism of action is not firmly established [37].

The counter-electrode is normally a conducting glass with a small amount of platinum adsorbed on the conducting-thin-film oxide that acts as catalyst in the I_3^- reduction; i.e., it facilitates electron exchange of the counter-electrode with the iodide/triiodide redox couple. The TCO is used as electrode because the redox couple I^-/I_3^- corrodes many metals. Carbon materials [40] and polymers [41]-[43] have been employed as counter electrode although lower efficiencies have been obtained. These materials have the advantage that they are stable to corrosion and that they can be employed at low cost in roll-to-roll fabrication of flexible DSSC.

A hot melt polymer sealant serves to join together both electrodes. It is shaped to surround the sensitized TiO_2 . The sealant is 25-50 μm thick and it also serves to avoid contact of the sensitized TiO_2 with the counter-electrode.

DSSC working principle. In a traditional semiconductor-electrolyte interface a junction also forms (a depleted region where an electric field exists). It is due to charge transfer between the two contacting materials and it occurs in an analogous way as in the p-n junction; it is very similar to the semiconductor-metal junction produced by the contact of these two types of materials.

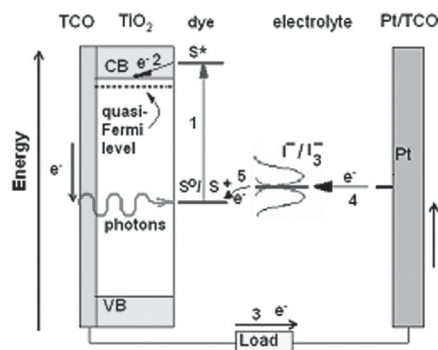


Figura 2. Energy levels in a DSSC under illumination. CB, conduction band. VB, valence band. S^* , electron excited state in the dye. S_0/S^+ , electron HOMO state in the dye: S_0 is the ground state and S^+ the state without an electron. The Gaussian distributions of iodide/triiodide (I^-/I_3^-) species become equal at the redox potential E_{redox} that is practically equal to the Pt Fermi energy.

In DSSC, nanocrystals are surrounded by electrolyte. According to calculations the electric field in the TiO_2 nanocrystals-electrolyte interface is very small; it is not capable of separating charges as in conventional solar cells [44]. Because of nanocrystals size then, DSSC must be based on a different working principle if compared with traditional solar cells. It has been discussed to a great extent in the literature whether a macroscopic field to drive carriers toward the contact exists or not. There is a lot of evidence and it is widely accepted now that such field does not exist and that carriers move by diffusion, i.e., due to charge carriers concentration gradients in the device [45]-[47].

Which is the origin of photovoltage in DSSC then? In the electrolyte there are allowed energy ranges for reduced and for oxidized species. Their Gaussian probability distribution is exemplified in Fig. 2. Both distributions cross at the energy for which reduced and oxidized species are equally probable and therefore probability value is $1/2$. This can be thought of as a "Fermi level" for redox species and it is called redox potential E_{redox} . In the dark all "Fermi energies" line up; as explained before for p-n junctions. When the device is illuminated, electrons in the dye absorb photons and occupy energy levels in the dye which lie above the TiO_2 conduction band empty states (process 1 in Fig. 2). Electrons are injected on a subpicosecond timescale [48] from the dye to the TiO_2 conduction band states that have lower energies (process 2 in Fig. 2). This process competes and it needs to be faster (higher probability) than the excited state decay, typically 100 ps - 1 ns [49]. A quasi equilibrium state is reached for a constant light intensity, i.e., a quasi-equilibrium excess electron concentration appears in the TiO_2 conduction band and the electron distribution is no longer described by the Fermi energy but by the quasi-Fermi energy. In the dark, because of its wide bandgap, TiO_2 is practically an isolator; free electron concentration at room temperature is negligible. Therefore, majority carrier concentration increases due to concentration of electrons injected from the dye and QFL E_n is significantly different from the Fermi energy level in the dark. If the external circuit is open and no current flows, the *open-circuit photovoltage* V_{oc} , is given by the difference between the TiO_2 electrons QFL and the electrolyte redox potential:

$$eV_{oc} = F_n - E_{redox} \quad (1)$$

The oxidized dye left behind by the electron injected to the TiO_2 (S^+ in Fig. 2) is rapidly regenerated by the electrolyte (process 5 in Fig. 2). This process is essential in DSSC. When trying to substitute the I^-/I_3^- redox pair, it has been demonstrated that the lower efficiencies obtained were related to a slower dye regeneration rate [50]. I^- oxidizes to I_3^- while at the counter-electrode I_3^- is reduced to I^- (process 4 in Fig. 2). Therefore, I_3^- is produced at the photoelectrode and consumed at the counter-electrode (it is often considered as the “hole carrier” by analogy with traditional solar cells). I^- is produced at the counter-electrode and diffuses to the photoelectrode where it changes to I_3^- when it gives an electron to the dye.

The photocurrent appearance when the illuminated device is in a closed circuit can be understood from processes illustrated in Fig. 2. 1. An electron in the dye absorbs a photon occupying the excited state S^* . 2. The electron in S^* highest probability is to be injected to lower energy states in the nanocrystalline TiO_2 conduction band. 3. The electron is transported in the TiO_2 , in the TCO, in the external circuit, arriving finally at the counter electrode. 4. The electron passes to the electrolyte reducing a triiodide ion to iodide. 5. The electron is returned to the dye by an iodide ion that oxidizes to triiodide. Notice that the energy that electrons can give, i.e. that can be converted to work in the external circuit, is equal to the energy difference between the electron QFL and the electrolyte redox potential (see Fig. 2). Also notice that equilibrium hole concentration in the TiO_2 does not change, contrary to what happens in traditional solar cells. Light is absorbed by the dye and absorption by the TiO_2 is negligible because it only absorbs photons in the violet and ultraviolet ($E_g = 3.2$ eV, $\lambda < 387$ nm). The absence of holes in non-equilibrium avoids electron-hole recombination in the semiconductor. This is a situation very different to that existing in p-n junctions where minority carriers must diffuse to the depletion region before recombining. That light is absorbed in one medium and electrons are transported in another medium determines the absence of minority carriers in non-equilibrium. This is the reason why semiconductor purity is not crucial in DSSC; there is no need to avoid impurities and defects that favor recombination.

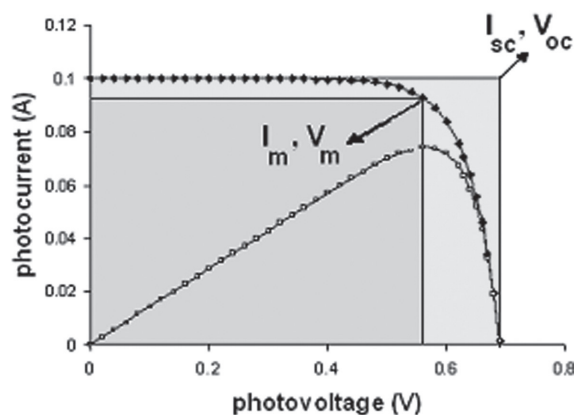


Figura 3: I-V characteristic for a solar cell. The product $IV=P$ is also shown as a function of photovoltage. The ratio of the two rectangles gives the fill factor FF

The QFL position depends on light intensity but also on the external load. As the external load is changed for constant incident radiation intensity, a dependence of photocurrent on voltage is obtained. DSSC show I-V and P-V curves similar to those of conventional solar cells (see Fig. 3). The following known equations are also valid for DSSC:

$$I = I_0 [\exp(-eV/nKT) - 1] - I_\phi \quad (2)$$

$$V_o = \frac{nKT}{e} \ln \frac{I_0}{I_\phi} \quad (3)$$

where I_0 is the saturation current; n is the so-called ideality factor; K is the Boltzmann constant, T the temperature. The current corresponding to the short-circuit condition, $R_L=0$, is called short-circuit current I_{sc} and the voltage corresponding to open-circuit, $R_L=\infty$, is called open-circuit photovoltage V_{oc} .

DSSC efficiency is obtained from the I-V dependence like in conventional solar cells. Efficiencies higher than 11% at one sun illumination have so far been obtained with DSSC [51]. The maximum efficiency is given by:

$$\eta_m = P_m / P_{in} = I_m V_m / P_{in} \quad (4)$$

where P_{in} is the incident radiation energy per second. The fill factor FF, is the ratio of the areas of two rectangles defined by the points I_m, V_m and I_{sc}, V_{oc} with the coordinates axis (see Fig. 3). FF characterizes the shape of the I-V curve and it is related to its efficiency:

$$FF = I_m V_m / V_{oc} I_{sc} = P_m / V_{oc} I_{sc} \quad (5)$$

Therefore:

$$\eta_m = V_{oc} I_{sc} FF / P_{in} \quad (6)$$

NANO-SIZED THREE-DIMENSIONAL STRUCTURE

In a quest to obtain higher-efficiency, more stable, longer lived and cheaper solar cells, different types of nanostructured solar cells have come up after O'Reagan and Grätzel's first report in 1991 [11].

Nanocrystals in DSSC in the range 10-50 nm do not generally show the confinement effect present in quantum dots of size ca. 1-10nm. In these nano-crystals the electron wave functions are strongly confined, so that the electron energy levels are discrete and their separation is determined by the crystal size. Nonetheless, the nanocrystalline character of the metal oxide in DSSC determines a different working principle. Let us summarize the implications of having a nano-sized three-dimensional (3D) structure in DSSC.

Light absorption by the sensitizer or dye is enormously enhanced since the real internal area of the semiconductor-oxide with the attached dye is orders of magnitude larger than the visibly apparent area.

It allows the electrolyte to penetrate and surround the semiconductor-oxide nanocrystals. Therefore, a 3D semiconductor-electrolyte interface is formed. It is not a 3D heterojunction, i.e., there is no macroscopic electric field at this 3D interface, so only diffusion current exists. There are no drift currents as in traditional solar cells.

It allows charge carriers to be transported in media different from the medium in which photon absorption creates them.

It is a majority carrier device. There are no excess minority carriers in the oxide-semiconductor where electrons are transported. Electron-hole recombination in the semiconductor does not play an important role in decreasing efficiency as in traditional solar cells. Therefore, no highly perfect and highly pure materials are required. This leads to the most important characteristic of DSSC: they are cheaper than traditional solar cells while having efficiency above 10%. This is not only because raw materials required are cheaper but also technological procedures: very high temperature processes are not needed; clean-room conditions are less necessary (high purity materials are not employed); technological equipment is not as expensive.

Notice that the electrolyte creates a perfect 3D interface because it can penetrate very well the pores and interstices. This is a great advantage of the liquid electrolyte. But, on the other hand, a perfect seal has not been accomplished; i.e., a sealant resistant to the highly reactive electrolyte to prevent leakage and/or evaporation of the solvent for several years. Also permeation of water or oxygen molecules that react with the electrolyte worsens cell performance. Therefore, a great disadvantage of DSSC is that they do not last long due to electrolyte and dye degradation. They have passed 1000h stability test at 55°C in a solar simulator (100 mW/cm²) maintaining 94% of its initial performance [52].

SOLID AND QUASI-SOLID SENSITIZED SOLAR CELLS (SSSC)

Difficulties caused by the liquid electrolyte in DSSC has motivated research to replace it with solid or quasi-solid hole conductors, such as ionic electrolytes, p-type semiconductors or polymers. A brief review follows of some published reports on solid nanostructure sensitized solar cells (SSSC).

Ionic liquid electrolytes. Ionic liquids constitute the source of both, the redox pair and the solvent. Although most of them are in the liquid state at room temperature, they have good chemical and thermal stability, as well as negligible vapor pressure; thus decreasing problems encountered with organic solvents.

Several ionic liquid electrolytes have been reported while imidazolium compounds have been the most frequently employed [53], [54]. High viscosity imidazolium iodides have yielded high stability cells with efficiencies around 6%. Very

viscous and solid electrolytes with low ion mobility and low conductivity[1] represent an obstacle for developing ionic electrolyte SSSC with high conversion efficiency. Some polymers [55], gelators [56], and composites [57] have been used as framework materials to solidify ionic liquid-based electrolyte; they also favor triiodide/iodide diffusion.

Power conversion efficiency ca. 8% has been achieved for SSSC with the lower-viscosity 1-ethyl-3-methylimidazolium selenocyanate (EMISeCN), a $\text{SeCN}^-/(\text{SeCN})_3^-$ based ionic electrolyte under AM 1.5 sunlight [58].

P type semiconductors. High band-gap inorganic semiconductors have been used as hole conductors to replace the liquid electrolyte. Technologically this is a much harder task than with liquid electrolytes. It must be guaranteed that the hole conductor penetrates pores all along the thickness of the mesoporous TiO_2 in order to contact the sensitizer but it must not contact the electron-extracting conducting electrode. CuI was the first p-type semiconductor to be used in a SSSC [59]. These CuI SSSC are not very stable [60]. Also incorporation of small quantity of 1-methyl-3-ethylimidazolium thiocyanate (MEISCN) improved the stability and 3.8 % efficiency was obtained [61].

Other p-type semiconductor used as hole conductor is CuSCN. It has been found to give more stable and durable SSSC but efficiencies obtained are lower than with CuI [62], [63].

NiO has been reported as hole conductor in SSSC [64], [65], as well as, CuAlO_2 [66]. Complete pore filling represents a problem if available fabrication techniques were to be used for wide-bandgap p-type oxides.

Organic p-type semiconductors are used as substitutes of inorganic ones for different devices in microelectronics and optoelectronics. They have also been studied as hole conductors in SSSC [67]-[69]. Efficiency values of 3.2% have been obtained using 2,2',7,7'-tetrakis(N,N-di-p-methoxyphenyl-amine)9'90-spirobifluorene (spiro-OMeTAD) [70]. There are several organic hole-conductors that have been utilized: pyrrole or polypyrrole [71],[72]; thiophene and polythiophene [73], [74]; poly(3,4-ethylenedioxythiophene, PEDOT [75], [76]; the polyanilines (PANIs) [77], [78].

Polymer electrolytes. Polymer electrolytes have the advantages of relatively high ionic conductivity and easy solidification. They have been used before in lithium batteries and in redox type laminated supercapacitors. In SSSC the polymer plays the role of the organic solvent in DSSC; the I^-/I_3^- redox couple is used dissolved in the polymeric medium [79]. Polymerization must occur in the presence of iodine and at an adequate temperature for the dye not to decompose. The two polymers that have been more frequently used in polymer electrolytes for SSSC are poly(ethylene glycol) (PEO) [80]-[82] and poly(epichlorohydrin-co-ethylene oxide), Epichlomer-16 [83]-[85]. Studies continue to improve results obtained with

electrolytes based on these polymers, as well as on other polymers [86]-[91].

EXTREMELY THIN ABSORBER (ETA) SOLAR CELLS

This solar cell type is similar to the p-type semiconductor SSSC. The difference is that also the sensitizer is replaced by a semiconductor. The eta solar cell consists of an extremely thin light-absorbing semiconductor sandwiched between two transparent, highly interpenetrated, nanostructured semiconductors – an n-type and a p-type [92]. Nanostructure wide-bandgap mesoporous oxide semiconductors are used also in eta solar cells, mainly TiO_2 . Good coverage of the nanostructure electrode by the extremely thin film absorber, as well as, the filling of the pores with the hole-transporting semiconductor is essential for device efficiency. The absorber must be extremely thin so that electron-hole pairs are created by photons next to the wide-band gap semiconductors or extremely close; i.e., so that electron-hole pairs do not recombine before being injected to the wide-bandgap semiconductors. Different narrow bandgap semiconductors have been proposed as light absorbers like CdTe [93], CdSe [94], CuO [95], CuInS_2 [92], [96]. Several wide bandgap semiconductors have been studied as hole conductors, e.g., CuI [97], CuSCN [98], [99], NiO [100], CuAlO_2 [101]. Efficiency so far is below 4% [102], [103].

OTHER TRENDS IN THE DEVELOPMENT OF NANOSTRUCTURED SOLAR CELLS

DSSC efficiency value of ca. 11% is acceptable if it were accompanied by solar cell long life. As mentioned before, the very reactive liquid electrolyte plus dye degeneration attempt against it. SSSC and eta solar cells show higher stability in general but lower efficiency. Charge transport in their respective hole conductors is not as efficient as in the electrolyte; either because of the viscosity of the solvent if ions are transported (ionic and polymer SSSC) or the poor pore filling and contact in the case of electronic conductivity (p-type semiconductor SSSC and eta solar cells). These problems lead to incomplete dye regeneration and low charge generation efficiencies [104]. An appropriate morphology of the porous wide-bandgap n-type semiconductor (TiO_2 most frequently) can help to minimize these difficulties. Therefore, different structures are being studied like nanorods [105], nanowires [106] and nanotubes [107]-[109]. All cases may ease penetration of the hole conductor in the mesopores and its contact with the sensitizer.

At present studies of quantum dots as sensitizers are being conducted. The energy bandgap value depends on quantum dot size; so the optical absorption spectrum can be tailored to obtain different color solar cells. Besides, they may have a large extinction coefficient which implies good light absorption efficiency. Different semiconductors with energy bandgap adequate for absorbing a significant part of the solar spectrum have been studied: CdSe [110]-[112]; CdTe [113], [114]; PbS [115], [116]; and CdS, that although it has a less appropriate bandgap value, it nicely renders nanocrystals of controlled size [117]-[119].

In traditional solar cells, ohmic metal-semiconductor contacts used to extract photogenerated carriers are very important. In DSSC not much attention has been given to electrical contact between the TiO_2 and the conducting glass (TCO) [120], [121], which is used instead of a metal contact to extract electrons. In Fig. 2 one must look in more detail to what happens between process 2 and 3, i.e. to electron transfer from the TiO_2 to the TCO. In this TiO_2 -TCO interface two loss mechanisms can be present: First, recombination of electrons in the TCO with species in the electrolyte. Since the TiO_2 is porous, the electrolyte can penetrate and contact the TCO allowing this recombination to occur. Second, a barrier exists at this interface due to differences in oxides work functions and affinity values [121]-[122]. Defects at this interface would affect this barrier. Therefore, contact resistivity could be affected. Conducting oxide type (ITO, FTO, etc), TiO_2 crystal structure and morphology, as well as, the technology used when forming the TiO_2 /TCO contact, should influence electron extraction efficiency at the TiO_2 -TCO interface. For example, a different electrical contact to the TCO is to be expected according to the TiO_2 porosity (electron recombination with the electrolyte changes) and adherence (contact resistivity plus electron recombination with the electrolyte change). Layers obtained by “doctor blading” a nanocrystalline TiO_2 suspension are porous as required but they do not adhere so well as sprayed films [123] or TiO_2 films obtained using MW-CBD [124][125][126][127], for example. Because of all this, the use of double layer TiO_2 structures has also received attention lately. The purpose is to avoid the recombination of electrons in the TCO with acceptor species in the electrolyte, [128][129], as well as, to improve electrical contact of the TiO_2 with the TCO [120]. The use of double layer structures has been considered essential in solid dye sensitized solar cells [130].

SUMMARY

New-concept nanostructured solar cells show great prospective among different solar cell types that are called to guarantee a significant percentage of electric energy used in the not too distant future. Their working principle, based on their three dimensional nanostructure, implies that no highly pure materials have to be used hence contributing to their low cost. Electron-hole pairs are created and transported by different materials thus avoiding recombinations. Diffusion due to charge-carriers-concentration gradients is responsible for charge transport since the nano-character of the semiconductor is not compatible with the existence of electric-field-driven current. Highest efficiency values have been found with liquid electrolytes corresponding to highest mobility value in the hole-extracting medium. At the same time, the liquid electrolyte causes short lifetimes. Different solutions to overcome this problem are under study given rise to different types of solid solar cells based on a three dimensional nanostructure which have been described along with research trends.

[1] IPCC, 2007: Summary for Policymakers. In: Climate Change 2007: Impacts, Adaptation and Vulnerability. Contribution of Working Group II to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change, M.L. Parry, O.F. Canziani, J.P. Palutikof, P.J. van der Linden, C.E. Hanson, Eds., Cambridge University Press, Cambridge, UK, 7-22

- [2] International Energy Agency, World Energy Outlook 2005, November 2005, page 132
- [3] R. L. Hirsch, Peaking of World Oil Production: Recent Forecasts. DOE NETL-2007/1263, February 2007
- [4] Report #: DOE/EIA-0484(2009), May 2009
- [5] IEA Energy Technology R&D Statistics Service, 2007, <http://www.iea.org/stats/rd.asp>
- [6] W. Hoffmann, Solar Energy Materials & Solar Cells 90, 3285 (2006)
- [7] Set for 2020 - Solar Photovoltaic Electricity: A mainstream power source in Europe by 2020- Executive Summary, Eu-ropean Photovoltaic Industry Association (EPIA), 2009, www.setfor2020.eu
- [8] Zh.I. Alferov, V.M. Andreev, Kh.K. Aripov, V.R. Larionov, V.D. Rumyantsev, *Geliotechnika* No 6 (1981), p. 3. Translated into English in: *Applied Solar Energy* No 6 (1981).
- [9] D. Cusano, *Solid State Electron.* 6, 217 (1963)
- [10] V. Petrova-Koch in: High-Efficient Low-Cost Photovoltaics Recent Developments, p. 1, edited by Vesselinka Petrova-Koch, Rudolf Hezel, Adolf Goetzberger, Springer (2008)
- [11] B. O'Regan, M. Gratzel, *Nature* 353, 737 (1991)
- [12] M. Gratzel, *Prog. Photovolt.* 8, 171 (2000)
- [13] A. Feltrin, A. Freundlich, *Renewable Energy* 33, 180 (2008)
- [14] W. Hoffmann, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 90, 3285 (2006)
- [15] B. Yoo, K. Kim, S. H. Lee, W. M. Kim, N-G Park, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 92, 873 (2008)
- [16] C. Longo, J. Freitas, M.-A. De Paoli, J. Photochem. & Photobiol. A-Chemistry 159, 33 (2003)
- [17] K. Onoda, S. Ngamsinlapasathian, T. Fujieda, S. Yoshika-wa, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 91, 1176 (2007)
- [18] F. O. Lenzmann and J.M. Kroon, *Advances in Optoelectronics* 2007, 65073 (2007)
- [19] R. Solarska, J. Augustynski, K. Sayama, *Electrochimica Acta* 52, 694 (2006)
- [20] A. N. M. Green, E. Palomares, S. A. Haque, J. M. Kroon, J. R. Durrant, *J. Phys. Chem. B* 109, 12525 (2005)
- [21] S. Chappel, A. Zaban, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 71, 141 (2002)
- [22] F. Lenzmann, J. Krueger, S. Burnside, K. Brooks, M. Grätzel, D. Gal, S. Rühle, D. Cahen, *J. Phys. Chem. B* 105, 6347 (2001)
- [23] K. Keis, E. Magnusson, H. Lindström, S-E. Lindquist, A. Hagfeldt, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 73, 51 (2002)
- [24] Y. Yoshida, S. Tokashiki; K. Kubota, R. Shiratuchi, Y. Yamaguchi, M. Kono, S. Hayase, *Energy Materials & Solar Cells* 92, 646 (2008)
- [25] R. Espinosa, I. Zumeta, J. L. Santana, F. Martinez-Luzardo, B. Gonzalez, S. Docteur, E. Vigil, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 85, 359 (2005)
- [26] G. Boschloo, T. Marinado, K. Nonomura, T. Edvinsson, A. G. Agrios, D. P. Hagberg, L. Sun, M. Quintana, C. S. Karthikeyan, M. Thelakkat, A. Hagfeldt, *Thin Solid Films* 516, 7214 (2008)
- [27] W. H. Howie, F. Claeysens, H. Miura, L. M. Peter, *J. Am. Chem. Soc.* 130, 1367 (2008)
- [28] X. M. Ma, J. L. Hua, W. J. Wu, Y. H. Jin, F. S. Meng, W. H. Zhan, H. Tian, *Tetrahedron* 64, 345 (2008)
- [29] P.V.V. Jayaweera, A.G.U. Perera, K. Tennakone, *Inorganica Chimica Acta* 361, 707 (2008)
- [30] F. Fabregat-Santiago, J. Bisquert, G. Garcia-Belmonte, G. Boschloo, A. Hagfeldt, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 87, 117 (2005)
- [31] H. Nussbaumer, J.-E. Moser, S. M. Zakeeruddin, M. K. Nazeeruddin, M. Grätzel, *J. Phys. Chem. B* 105, 10461 (2001)
- [32] B.A. Gregg, F. Pichot, S. Ferrere, and C. L. Fields, *J. Phys. Chem. B* 105, 422 (2001)
- [33] Z. Kebede, S.-E. Lindquist, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 57, 259 (1999)
- [34] K. Hara, T. Horiguchi, T. Kinoshita, K. Sayama, H. Ara-kawa, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 70, 151 (2001)
- [35] A. Fukui, R. Komiya, R. Yamanaka, A. Islam, L. Han, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 90, 649 (2006)
- [36] C. Shi, S. Dai, K. Wang, X. Pan, F. Kong, L. Hu, *Vibrational Spectroscopy* 39, 99 (2005)
- [37] G. Boschloo, L. Haggman, A. Hagfeldt, *J. Phys. Chem. B* 110, 13144 (2006)
- [38] K. Imoto, K. Takahashi, T. Yamaguchi, T. Komura, J. I. Nakamura, K. Murata, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 79, 459 (2003)
- [39] W. J. Lee, E. Ramasamy, D. Y. Lee, J. S. Song, *J. Photo-chem. Photobio. A-Chem.* 194, 27 (2008)
- [40] Z. Huang, X. Liu, K. Li, D. Li, Y. Luo, H. Li, W. Song, L. Chen, Q. Meng, *Electrochem. Comm.* 9, 596 (2007)
- [41] X. Fang, T. Ma, M. Akiyama, G. Guan, S. Tsunematsu, E. Abe, *Thin Solid Films* 472, 242 (2005)
- [42] W. Hong, Y. Xu, G. Lu, C. Li, G. Shi, *Electrochem. Comm.* 10, 1555 (2008)
- [43] J.-G. Chen, H.-Y. Weib, K.-C. Hoa, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 91, 1472 (2007)
- [44] A. Hagfeldt, M. Grätzel, *Chem. Rev.* 95, 49 (1995)
- [45] M. J. Cass, F. L. Qiu, Alison B. Walker, A. C. Fisher, and L. M. Peter, *J. Phys. Chem. B* 107, 113 (2003)
- [46] N. Kopidakis, E. A. Schiff, N.-G. Park, J. van de Lagemaat, A. J. Frank, *J. Phys. Chem. B* 104, 3930 (2000)
- [47] S. Rühle, T. Dittrich, *J. Phys. Chem. B* 109, 9522 (2005)
- [48] M. Grätzel, *J. Photochem. Photobio. A-Chem.* 164, 3 (2004)
- [49] J. R. Durrant, S. A. Haque, E. Palomares, *Coord. Chem. Rev.* 248, 1247 (2004)
- [50] G. Oskam, B.V. Bergeron, G.J. Meyer, P.C. Searson, *J. Phys. Chem. B* 105, 6867 (2001)
- [51] J. M. Kroon, N. J. Bakker, H. J. P. Smit, P. Liska, K. R. Thampi, P. Wang, S. M. Zakeeruddin, M. Grätzel, A. Hinsch, S. Hore, U. Würfel, R. Sastawan, J. R. Durrant, E. Palomares, H. Pettersson, T. Gruszecki, J. Walter, K. Sku-pien, G. E. Tulloch, *Prog. Photovolt. Res. Appl.* 15, 1 (2007)
- [52] P. Wang, S.M. Zakeeruddin, J.E. Moser, K. Nazeeruddin, T. Sekiguchi, M. Grätzel, *Nat. Mater.* 2, 402 (2003)
- [53] P. Wang, S.M. Zakeeruddin, J.E. Moser, M. Grätzel, *J. Phys. Chem. B* 107, 13280 (2003)
- [54] H. Paulsson, M. Berggrund, E. Svantesson, A. Hagfeldt, L. Kloo, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 82, 345 (2004)
- [55] A.F. Nogueira, M.-A. De Paoli, I. Montanari, R. Monkhous, J. Nelson, J.R. Durrant, *J. Phys. Chem. B* 105, 7517 (2001)
- [56] J. Xia, F. Li, C. Huang, J. Zhai, L. Jiang, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 90, 944 (2006)
- [57] B. Muthuraaman, S. Murugesan, V. Mathew, S. Ganesan, B. J. Paul, J. Madhavan, P. Maruthamuthu, S. A. Suthanthi-raraj, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 92, 1712 (2008)
- [58] P. Wang, S.M. Zakeeruddin, J. Moser, R. Humphry-Baker, M. Grätzel, *J. Am. Chem. Soc.* 126, 7164 (2004)
- [59] K. Tennakone, G. Kumara, A.R. Kumarasinghe, K.G.U. Wijayantha, P.M. Sirimanne, *Semicond. Sci. Technol.* 10, 1689 (1995)
- [60] P.M. Sirimanne, T. Jeranko, P. Bogdanoff, S. Fiechter, H. Tributsch, *Semicond. Sci. Technol.* 18, 708 (2003)
- [61] Q.B. Meng, K. Takahashi, X.T. Zhang, I. Sutanto, T.N. Rao, O. Sato, A. Fujishima, H. Watanabe, T. Nakamori, M. Uragami, *Langmuir* 19, 3572 (2003)
- [62] J. Bisquert, V. S. Vikhrenko, *J. Phys. Chem. B* 108, 2313 (2004)
- [63] B. C. O'Regan, F. O. Lenzmann, *J. Phys. Chem. B* 108, 4342 (2004)
- [64] L. Bandara, H. Weerasinghe, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 85, 385 (2005)
- [65] Y-M Lee, C-H. Hsu, H-W. Chen, *App. Surf. Sc.* 255, 4658 (2009)
- [66] J. Bandara and J. P. Yasomane, *Semicond. Sci. Technol.* 22, 20 (2007)
- [67] U. Bach, D. Lupo, P. Comte, J.E. Moser, F. Weissortel, J. Salbeck, H. Spreitzer, M. Grätzel, *Nature* 395, 583 (1998)
- [68] J. Kruger, R. Plass, L. Cevey, M. Piccirelli, M. Grätzel, U. Bach, *Appl. Phys. Lett.* 79, 2085 (2001)
- [69] F. Fabregat-Santiago, J. Bisquert, E. Palomares, S. A. Haque, J. R. Durrant, *J. Appl. Phys.* 100, 034510 (2006)
- [70] J. Kruger, R. Plass, M. Grätzel, H.J. Matthieu, *Appl. Phys. Lett.* 81, 367 (2002)
- [71] K. Murakoshi, R. Kogure, Y. Wada, S. Yanagida, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 55, 113 (1998)
- [72] T. Kitamura, M. Maitani, M. Matsuda, Y. Wada, S. Yana-gida, *Chem. Lett.* 30, 1054 (2001)
- [73] G. P. Smestad, S. Spiekermann, J. Kowalik, C. D. Grant, A. M. Schwartzberg, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 76, 85 (2003)
- [74] W. S. Shin, S. C. Kim, S.-J. Lee, H.-S. Jeon, M.-K. Kim, B. V. K. Naidu, S.-H. Jin, J.-K. Lee, J. W. Lee, Y.-S. Gal, *J. Polymer Sc. Part A: Polymer Chem.* 45, 1394 (2007)
- [75] Y. Saito, N. Fukuri, R. Senadeera, T. Kitamura, Y. Wada, S. Yanagida, *Electrochem. Commun.* 6, 71 (2004)

- [76] E.M.J. Johansson, A. Sandell, H. Siegbahn, H. Rensmo, B. Mahrov, G. Boschloo, E. Figgemeier, A. Hagfeldt, S.K.M. Jönsson, M. Fahlman, *Synthetic Metals* 149, 157 (2005)
- [77] S. Tan, J. Zhai, B. Xue, M. Wan, Q. Meng, Y. Li, L. Jiang and D. Zhu, *Langmuir* 20 2934 (2004)
- [78] G.K.R. Senadeera, T. Kitamura, Y. Wada, S. Yanagida, J. Photochem. Photobiol. A-Chem. 164 61 (2004)
- [79] A. F. Nogueira, C. Longo, M.-A. De Paoli, *Coord. Chem. Reviews* 248 1455 (2004)
- [80] F. Croce, G. B. Appetecchi, L. Persi, B. Scrosati, *Nature* 394, 456 (1998)
- [81] Y. J. Ren, Z. C. Zhang, S. B. Fang, M. Z. Yang, S. M. Cai, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 71, 253 (2002)
- [82] M. S. Kang, J. H. Kim, Y. J. Kim, J. Won, N. G. Park, Y. S. Kang, *Chem. Commun.*, 889 (2005)
- [83] A. F. Nogueira, M. A. De Paoli, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 61, 135 (2000)
- [84] A. F. Nogueira, J. R. Durrant, M. A. De Paoli, *Adv. Mater.* 13, 826 (2001)
- [85] S. A. Haque, E. Palomares, H. M. Upadhyaya, L. Otley, R. J. Potter, A. B. Holmes, J. R. Durrant, *Chem. Commun.*, 3008 (2003)
- [86] M. Matsumoto, Y. Wada, T. Kitamura, K. Shigaki, T. Inoue, M. Ikeda, S. Yanagida, *Bull. Chem. Soc. Japan* 74, 387 (2001)
- [87] G. Katsaros, T. Stergiopoulos, I. M. Arabatzis, K. G. Papadokostaki, P. Falaras, J. Photochem. Photobiol. A-Chem. 149, 191 (2002)
- [88] E. Stathatos, P. Lianos, U. Lavrencic-Stangar, B. Orel, *Adv. Mater.* 14, 354 (2002)
- [89] Y. Shibata, T. Kato, T. Kado, R. Shiratuchi, W. Takashima, K. Kaneto, S. Hayase, *Chem. Commun.*, 2730 (2003)
- [90] J. H. Kim, M.-S. Kang, Y. J. Kim, J. Won, N.-G. Park, Y. S. Kang, *Chem. Commun.*, 1662 (2004)
- [91] H. Han, U. Bach, Y.-B. Cheng, R. A. Caruso, *Appl. Phys. Lett.* 90, 213510 (2007)
- [92] I. Kaiser, K. Ernst, Ch.-H. Fischer, R. Könenkamp, C. Rost, I. Sieber, M. Ch. Lux-Steiner, *Solar Energy Mater. Solar Cells* 67, 89 (2001)
- [93] R. Tena-Zaera, A. Katty, S. Bastide, C. Levy-Clement, B. O'Regan, V. Munoz-Sanjose, *Thin Solid Films* 483, 372 (2005)
- [94] C. Lévi-Clément, R. Tena-Zaera, M. A. Ryan, A. Katty, G. Hodes, *Adv. Mater.* 17, 1512 (2005)
- [95] E. Vigil, B. González, I. Zumeta, C. Domingo, X. Domènech, J. A. Ayllón, *Thin Solid Films* 489, 50 (2005)
- [96] M. Nanu, J. Schoonman, A. Goossens, *Adv. Mater.* 16, 453 (2004)
- [97] T. Taguchi, X. T. Zhang, I. Sutanto, K. Tokuhito, T. N. Rao, H. Watanabe, T. Nakamori, M. Uragami, A. Fujishima, *Chem. Commun.* 19, 2480 (2003)
- [98] K. Ernst, A. Belaidi, R. Könenkamp, *Semicond. Sci. Technol.* 18, 475 (2003)
- [99] P. M. Sirimanne, T. Jeranko, P. Bogdanoff, S. Fiechter, H. Tributsch, *Semicond. Sci. Technol.* 18, 708 (2003)
- [100] J. Bandara, H. C. Weerasinghe, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 85, 385 (2005)
- [101] J. Bandara, J. P. Yasomanee, *Semicond. Sci. Technol.* 22, 20 (2007)
- [102] R. Tena-Zaera, M. A. Ryan, A. Katty, G. Hodes, S. Bas-tide, C. Levy-Clement, *C. R. Chim.* 9, 717 (2006)
- [103] O. Niitsoo, S. K. Sarkar, C. Pejoux, S. Rühle, D. Cahen, G. Hodes, J. Photochem. Photobiol. A-Chem. 181, 306 (2006)
- [104] L. Schmidt-Mende, M. Grätzel, *Thin Solid Films* 500, 296 (2006)
- [105] M. Y. Song, Y. R. Ahn, S. M. Jo, D. Y. Kim, J.-P. Ahn, *Appl. Phys. Lett.* 87, 113113 (2005)
- [106] M. Law, L. E. Greene, J. C. Johnson, R. Saykally, P. Yang, *Nature Mat.* 4, 455 (2005)
- [107] J. R. Jennings, A. Ghicov, L. M. Peter, P. Schmuki, A. B. Walker, *J. Am. Chem. Soc.* 130, 13364 (2008)
- [108] G. K. Mor, K. Shankar, M. Paulose, O. K. Varghese, C. A. Grimes, *Appl. Phys. Lett.* 91, 152111 (2007)
- [109] K. Shankar, G. K. Mor, H. E. Prakasham, O. K. Varghese, C. A. Grimes, *Langmuir* 23, 12445 (2007)
- [110] J. Chen, J. L. Song, X. W. Sun, *Appl. Phys. Lett.* 94, 153115 (2009)
- [111] S.-Q. Fan, D. Kim, J.-J. Kim, D. W. Jung, S. O. Kang, J. Ko, *Electrochem. Comm.* 11, 1337 (2009)
- [112] L. J. Diguna, Q. Shen, J. Kobayashi, T. Toyoda, *Appl. Phys. Lett.* 91, 23116 (2007)
- [113] X.-F. Gao, H.-B. Li, W.-T. Sun, Q. Chen, F.-Q. Tang, L.-M. Peng, *J. Phys. Chem. C* 113, 7531 (2009)
- [114] G.-Y. Lan, Z. Yang, Y.-W. Lin, Z.-H. Lin, H.-Yi Liao, H.-T. Chang, *J. Mater. Chem.* 19, 2349 (2009)
- [115] R. J. Ellingson, M. C. Beard, J. C. Johnson, P. R. Yu, O. I. Micic, A. J. Nozik, A. Shabaev, A. L. Efros, *Nano Lett.* 5, 865 (2005)
- [116] W. Lee, J. Lee, S. K. Min, T. Park, W. Yi, S.-H. Han, *Mater. Sc. & Eng. B* 156, 48 (2009)
- [117] W. Lee, J. Lee, S. Lee, W. Yi, S.-H. Han, B. W. Cho, *Appl. Phys. Lett.* 92, 153510 (2008)
- [118] C.-H. Chang, Y.-L. Lee, *Appl. Phys. Lett.* 91, 53503 (2007)
- [119] S.-C. Lin, Y.-L. Lee, C.-H. Chang, Y.-J. Shen, Y.-M. Yang, *Appl. Phys. Lett.* 90, 143517 (2007)
- [120] I. Zumeta, J.A. Ayllón, B. Gonzalez, X. Domenech, E. Vigil, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 93, 1728 (2009)
- [121] H. J. Snaith, M. Grätzel, *Adv. Mater.* 18, 1910 (2006)
- [122] S. Rühle, D. Cahen, *J. Phys. Chem. B* 108, 17946 (2004)
- [123] L. Kavan, M. Grätzel, *Electrochim. Acta* 40, 643 (1995)
- [124] E. Vigil, L. Saadoun, J. A. Ayllón, X. Domènech, I. Zu-meta, R. Rodríguez-Clemente, *Thin Solid Films* 365, 12 (2000)
- [125] E. Vigil, B. González, I. Zumeta, S. Docteur, A. M. Peiró, D. Gutiérrez-Tauste, C. Domingo, X. Domènech, J. A. Ayllón, *J. Crystal Growth* 262, 366 (2004)
- [126] E. Vigil, J. A. Ayllón, A. M. Peiró, R. Rodríguez-Clemente, X. Domènech, J. Peral, *Langmuir* 17, 891 (2001)
- [127] I. Zumeta, R. Espinosa, J.A. Ayllón, E. Vigil, *Semicond. Sci. Technol.* 17, 1218 (2002)
- [128] P. J. Cameron, L. M. Peter, *J. Phys. Chem. B* 109, 7392 (2005)
- [129] T. Sreethawong, Y. Suzuki, S. Yoshikawa, S. Ngamsinla-pasathian, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 86, 269 (2005)
- [130] B. Peng, G. Jungmann, C. Jäger, D. Haarer, H.-W. Schmidt, M. Thelakkat, *Coordination Chemistry Reviews* 248, 1479 (2004)

MICROFLUIDOS: NUEVAS FRONTERAS

D. FERNÁNDEZ RIVAS

Departamento de Ingeniería Nuclear, Facultad de Ciencias y Tecnología Nuclear, Instituto Superior de Tecnología y Ciencias Aplicadas InSTEC. Cuba. d.fernandezrivas@utwente.nl

La Microfluídica ha abierto nuevas fronteras en cuanto a las posibilidades de control y aplicaciones en las pequeñas dimensiones que comprende. Aquí se relacionan diversas aplicaciones y dispositivos que se han empleado hasta la fecha, haciendo hincapié en aquellas que pudieran ser de interés para la ciencia en Cuba, o sea, las relacionadas con las Ciencias de la Vida, como la medicina, la biotecnología y la genómica, entre otras.

Microfluidics has opened new frontiers due to the control abilities and new applications at minute dimensions. This work is dedicated mainly to highlight several applications and devices used up to date. The focus is set on those applications of probable interest to Cuba, which means, those related with Life Sciences; Medicine, Biotechnology, Genomics, etc.

Palabras Clave. Mecánica de Fluidos Aplicada 47.85.-g, Sistemas Microelectromecánicos (MEMS) en fluidos 47.61.Fg

INTRODUCCIÓN

La microfluídica es una actividad de reciente aparición y sus características fundamentales son el empleo y control de pequeños volúmenes (líquidos o gaseosos) y la multidisciplinaria complejidad de los principios físicos y los dispositivos empleados.[1] Cuenta con abundantes financiadores, como las industrias farmacéuticas y las transnacionales de la actividad química.

La multidisciplinaria se demuestra en algunas de las actividades relacionadas:

- Microfabricación
- Química, Biología, Física, Ciencia de materiales en la microescala
- Mecánica, Modelos numéricos, Sistemas de control
- Integración de sistemas y empaque, Ingeniería de confiabilidad (reliability).

La charla impartida por Feynman en 1959[2] fue seminal en lo tocante a la micro- y nanoescala. Posteriormente, en 1983, anticipó muchos de los dispositivos de los Sistemas Micro-Electro-Mecánicos (Micro Electro Mechanical Systems, MEMS, por sus siglas en inglés), la actuación electrostática y el rol de la fricción y adherencia.[3]

El desarrollo de los dispositivos microfluídicos se aceleró luego de publicarse el trabajo de Manz,[4] quien presentó el concepto revolucionario de Micro Sistemas de Análisis Total (Micro Total Analysis Systems, TAS). El mismo persigue realizar en un dispositivo, toda una serie de análisis consecutivos que se complementan (para más detalles vea[1]). La posibilidad de integrar varios canales fluidicos en un mismo dispositivo permitió la integración de análisis diversos. El concepto Laboratorio-en-un-chip (Lab-on-a-chip) parece ser una extensión del TAS y plantea la integración en un solo dispositivo de los componentes necesarios para realizar la síntesis química de compuestos, o bien el análisis (caracterización,

identificación y separación) y otras reacciones complejas, pero con la menor cantidad posible de sustancias.[5,6]

Se ve a la microfluídica como interfaz entre la nanoescala y la macroescala; la mesoescala. El término mesoescala (en la química y física) ha emergido como aquella en la cual se puede hablar de propiedades de materiales o fenómenos sin discutir el comportamiento de átomos individuales pero con características singulares cuando se compara con los fenómenos conocidos tradicionalmente. Los fenómenos en la mesoescala controlan las propiedades y comportamiento de diferentes materiales, como puede ser materia suave condensada-soft condensed matter, fluidos de surfactantes, coloides, polímeros, sistemas biológicos como proteínas, ADN y otros.[7-9]

Si bien la situación de la Microfluídica en Cuba es apenas embrionaria, se cree que podría beneficiar a varias ramas de la ciencia cubana, principalmente a la medicina y la biotecnología. Este artículo pretende ilustrar y relacionar algunos trabajos de posible interés para científicos cubanos que podrían emplear la Microfluídica en sus actividades como pudiera ser el caso del Centro de Inmunoensayos (CIE), Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE), Centro de Investigaciones de Microelectrónica CIMECUJAE y el Instituto Central de Investigación Digital ICID, por solo mencionar algunos.

PRECEDENTES Y SITUACIÓN ACTUAL

Durante la década de 1980, el avance fundamental en los microfluidos fue en lo tocante al desarrollo de microválvulas, microsensors y microbombas. Luego los campos de aplicación de los microfluidos han sido las ciencias de la vida y la química (MEMS-fluidic, Bio-MEMS, microfluidics).[4,10] Esta temática ha recibido atención debido a:

- La disponibilidad de métodos de fabricación de dispositivos de escalas inferiores a la decena de micrómetros.[11-13]
- El desarrollo en la biología y la biotecnología que permiten la manipulación celular, la detección de pequeñas cantidades de sustancia y el control de volúmenes ínfimos (menores que los microlitos).[14,15]
- La demanda de dispositivos portátiles y baratos para tareas analíticas (kits de detección de enfermedades o concentración de sustancias en fluidos corporales).[6,16]
- El potencial de los microsistemas para la realización de estudios fundamentales de física, química y biología.[8]

Algunos dispositivos, fenómenos peculiares y aspectos de la microfabricación. En la actualidad se usa cotidianamente equipamiento que contiene dispositivos de microfluidos. Pongámonos por ejemplo el uso de sensores de bolsas de aire (airbags) en los automóviles que funcionan como acelerómetros y recientemente la incorporación de sensores de movimiento en teléfonos móviles.[17]

Una ventaja de emplear líquidos en la microescala es el efecto de las fuerzas viscosas en ciertas aplicaciones como los sensores T, que consisten en una geometría simple en la que dos canales se combinan a 90° y se pueden realizar múltiples experimentos, mediciones y aplicaciones con relativa sencillez p.ej. mediciones de viscosidad, difusión.[18] Otro dispositivo muy simple (unión de dos sensores T) es el conocido Filtro H, que permite la extracción continua de analitos moleculares de fluidos que contienen partículas que interfieren entre sí (glóbulos rojos, microorganismos, polvo, virus), sin necesidad de utilizar una membrana filtro o componentes desechables. El dispositivo funciona de modo similar al Sensor T en el que la diferencia de coeficientes de difusión de las diferentes moléculas permite separar los componentes.[19,20]

La dificultad existente al intentar controlar ínfimas cantidades de fluidos ha impulsado el desarrollo de métodos novedosos de bombeo. Las microbombas han sido clasificadas de acuerdo al principio de funcionamiento: mecánicas (rotatorias, diafragmas vibrantes y peristálticas); electrocinéticas y magnetocinéticas (electrohidrodinámicas, electroosmóticas y magnetohidrodinámicas); cambio de fase (bombas de burbujas y electroquímicas). Es importante señalar que la gravedad puede ser utilizada también en algunos casos lo cual representa una solución accesible a las condiciones experimentales limitadas de los países en desarrollo, como ha sido demostrado en Cuba.[21]

En el diseño y fabricación de los dispositivos de microfluidos se ha dado mayor importancia a la simplicidad por encima de la complejidad, y otro tanto a la funcionalidad sobre la miniaturización. Estos factores han estado condicionados por los elevados costos de las tecnologías de fabricación, las limitaciones de empleo de diferentes materiales, así como la dificultad de bombeo a tales escalas. Estas limitaciones impulsaron la búsqueda de nuevos materiales y conceptos de utilización de dispositivos lo más simples posibles y que, a la vez, no fueran costosos, ya que en muchos casos deben ser desechados luego

de ser empleados. El principal método de fabricación consiste en el empleo de moldes reutilizables de modo que la replicación de los dispositivos no sea un problema. La interconexión de los dispositivos se logra utilizando monturas especiales que pueden ser utilizadas una y otra vez, y que tienen los sensores y sistemas de conexión debidamente instalados.

Numerosas publicaciones y libros describen los medios de fabricación, pudiéndose resaltar dos estrategias básicas:[22-25]

- De arriba a abajo (Top-down) basada en crear patrones a gran escala y reducir luego las dimensiones laterales
- De abajo a arriba (Bottom-up) basada en organizar átomos y moléculas en nanoestructuras que luego tienen propiedades específicas utilizables en alguna aplicación.

El empleo de la litografía blanda (soft lithography) es una opción para los países en desarrollo. Generalizando, consiste en el empleo de un chip de silicio en el que sobresale el patrón al relieve con las características geométricas deseadas (realizado con técnicas usuales de la microfabricación en salas limpias -cleanrooms) o alternativamente empleando impresoras convencionales y transparencias que permitan transferir el diseño de los microcanales a un substrato dado. Sobre él se vierte una capa de silicona, que al ser curada (cocinada en un horno, o ¡tal vez al sol!) se separa del chip, teniendo en una de sus caras el patrón en negativo. Se perforan agujeros para permitir la conexión de tubos. Luego, esta cara se puede cubrir con vidrio u otro material. Otra interesante posibilidad es el uso de papel convencional para aplicaciones fundamentalmente orientadas a países en desarrollo.¹⁶

Aplicaciones, aspectos comerciales y científicos. Es imposible resumir en pocas páginas todo el potencial de los microfluidos, pero es menester mencionar ciertos trabajos. Habida cuenta del desarrollo alcanzado por nuestro país en la elaboración de vacunas, medicamentos y otros, se da un mayor peso a los conceptos de microreactores, μ TAS y Laboratorios-en-un-chip (LOC-del inglés Lab-on-a-chip).

La microfluídica promete ser el segmento más dinámico del impulso que tienen los MEMS como lo demuestra el creciente número de publicaciones que versan sobre los microfluidos (véa Figura 1).

El impacto de los microfluidos en la química analítica ha sido similar al de los circuitos integrados en la electrónica y la computación, ya que se realizan de manera automatizada análisis en paralelo. Los resultados de dichos procedimientos puede ser monitoreados con el uso de computadoras en fracciones de segundos, lo que no se logra con experimentos clásicos en un laboratorio convencional.

El análisis casi instantáneo se logra mediante el empleo de ínfimas cantidades de reactivos, y a la par se reducen costos. Entre las aplicaciones más frecuentes se encuentran: diagnóstico médico, secuenciado genético, producción química, descubrimiento de medicamentos y proteómica. Los sistemas LOC han

sido empleados eficientemente en aplicaciones biomédicas y de monitoreo ambiental, así como para la detección de la presencia de iones en fluidos orgánicos, la identificación forense de explosivos, el seguimiento de contaminantes en el agua y atmósfera, el control de la calidad de alimentos, técnicas analíticas o de preparación tales como separación, marcaje químico y detección y otros procesos de la industria química.[16,20,26–30]

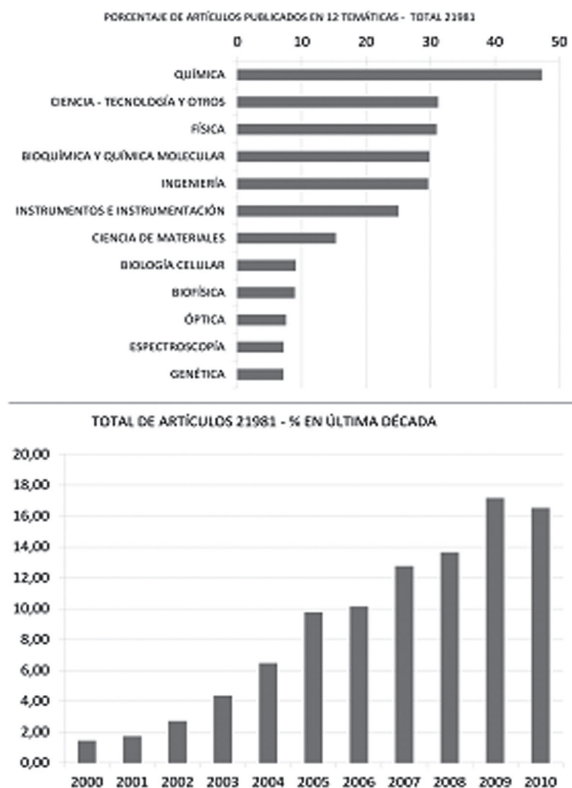


Figura 1: Resultados de búsqueda de artículos publicados en el Web of Science (ISI Web of Knowledge), para un total de 21981 artículos desde 1987

El embalaje y ensamblaje de los dispositivos microfluídicos, así como su interconexión, es tarea difícil, sobre todo cuando se debe tener en cuenta, la biocompatibilidad del dispositivo con las sustancias que fluirán por él y su inserción en el mercado. La durabilidad y posibilidad de reutilizar los dispositivos también es importante. Se prevé un mayor empleo de dispositivos plásticos desechables y de bajo impacto ambiental, debido a sus ventajas económicas y a la garantía de que las muestras no se contaminarán por usos anteriores. Sensores.

Sensores. Gran parte del reto que representa la microfluídica ha sido el desarrollo de sensores capaces de registrar las magnitudes sin afectar sustancialmente el flujo o sistema. Es necesario señalar que la energía y momento de estos flujos es muy baja y por tanto la interacción flujo/sensor debe mantenerse lo más baja posible. Si además se requiere medir la variación temporal de una magnitud, aparecen interrogantes sobre el proceso de calibración y significado físico de la magnitud en cuestión. Las técnicas no invasivas, como las ópticas, han tenido los mejores

resultados; tal es el caso de la Velocimetría de Imágenes de Partículas (Particle Image Velocimetry, PIV, por sus siglas en inglés). Sin embargo su empleo está restringido a flujos contenidos en medios transparentes a la luz.[31,32] Otro ejemplo es la microscopía de fluorescencia, en la que se emplea un pulso de láser de alta intensidad para crear fosforescencia química en un pequeño elemento de fluido, y luego se sigue el movimiento visualizando en el microscopio el perfil de velocidad y recientemente mediciones citométricas de células en microcanales.[33,34]

El empleo de microsensors de diferentes tipos se ha generalizado. Hay sensores infrarrojos, otros permiten realizar espectrometría de masa, Raman, fotoacústica; cromatografía líquida y columnas de separación más compactas.[35–40] La resonancia magnética nuclear no ha escapado tampoco al proceso de miniaturización (véa Figuras 2 y 3).[42,43]

Sentido práctico -escalamiento Es lógico preguntarse: ¿Es posible lograr aplicaciones prácticas o la factibilidad de producción masiva más allá de la curiosidad científica? El comportamiento en un microcanal puede ser replicado, de manera que distintos microcanales pueden ser conectados y controlados a la vez.[44] De aquí viene la estrategia de escalar la producción de algún producto, no mediante la construcción de dispositivos (reactores) más grandes a semejanza, sino conectando en paralelo múltiples dispositivos (microrreactores) lo que se conoce como numbering up. A modo de ilustración se puede decir que el flujo capilar típico en microrreactores se encuentra entre 0,1 $\mu\text{L/s}$ y 10 $\mu\text{L/s}$ para diámetros en el rango de 100 μm hasta 400 μm . De modo que con 10-100 capilares operando en paralelo en un sustrato de 30 centímetros cuadrados, se pudiera obtener una salida de 0.3-3 toneladas por año.[45] Los microrreactores de flujo continuo han sido de gran utilidad en reacciones químicas de pequeños volúmenes, como la síntesis de cantidades del orden de los nanogramos, para compuestos altamente sensibles.[46,47] Un ejemplo de manipulación de reactivos caros y peligrosos lo es el empleo de un circuito de microfluidos que realiza cinco pasos secuenciales con el objeto de sintetizar una sonda molecular radiomarcada para ser empleada en tomografía por emisión de positrón (Positron Emission Tomography, PET, por sus siglas en inglés), con lo que se logra acelerar el proceso sintético y ahorrar en los reactivos y solventes requeridos.[48] El empleo de los PET ha revolucionado la medicina nuclear en actividades tan importantes como el diagnóstico y tratamiento de enfermedades como el cáncer. En Cuba se han realizado algunos estudios relacionados con generadores de radionúclidos para estas aplicaciones, mediante el empleo de microflujos a través de resinas especiales.[49,50]

Empleo de flujos multifásicos. Se entiende que un flujo es multifásico cuando se presentan al menos dos sustancias diferentes o la misma en varios estados de agregación en movimiento. Por ejemplo, sistemas de gotas o burbujas en movimiento. En esta sección se relacionan trabajos de importancia y posible empleo en Cuba dada su simplicidad de fabricación y utilización.

Microfluidos multifásicos pueden ser utilizados de varias maneras: gotas como actuantes para mezclar o inducir flujo,

gotas como microreactores químicos y biológicos, formación de emulsiones con tamaño y distribución controlados, por ejemplo para la generación de agentes de contraste para el análisis de ultrasonido médico. En todos los casos es necesario entender y dominar los procesos de formación, traslación, mezclado interno, coalescencia y ruptura de las gotas/burbujas que fluyen normalmente a bajos números de Reynolds, así como las posibilidades de llevar a cabo reacciones químicas en forma controlada.[51-57]

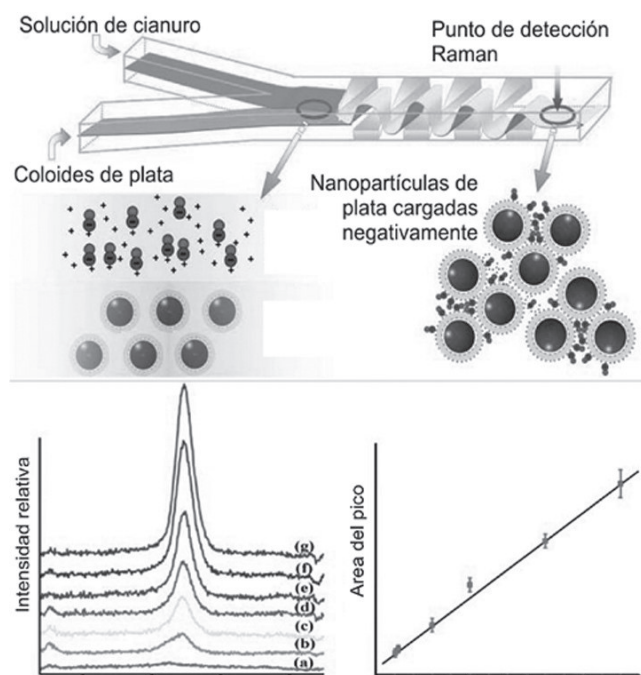


Figura 2: Análisis ultrasensible de trazas de agua contaminada con cianuro, empleando espectrometría Raman de superficie mejorada. Adaptado de [41]

Al trabajar con pequeñas cantidades de reactivos, se minimiza el riesgo de reacciones exotérmicas o explosivas así como el gasto en reactivos si no se logra el resultado esperado. Se pueden estudiar diferentes variantes de una misma reacción en paralelo y encontrar un óptimo de operación en menor tiempo. El mezclado dentro de una gota (sin dispersión axial) puede ser mucho más rápido que en un reactor químico convencional. Las herramientas de modelación numérica han sido muy útiles en estos estudios, así como la comparación con mediciones experimentales y ya en Cuba se han iniciado estudios en este campo.^{21,58,59}

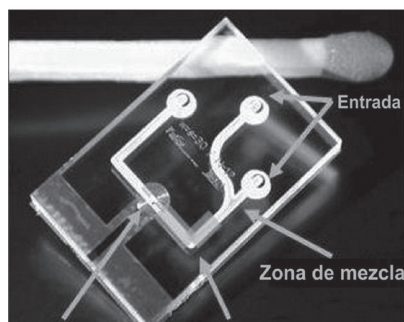


Figura 3: Comparación de un dispositivo para resonancia magnética nuclear y un fósforo. Cortesía J. Bart (vea [42])

En muchos casos hay que controlar la cantidad de sustancia que se va a introducir en un sistema vivo para la liberación controlada del medicamento, o en el caso de compuestos para reacciones químicas complejas o peligrosas y se preparan entonces emulsiones y similares soluciones. El control de la formación de emulsiones o la formación de burbujas muy pequeñas se logra sin grandes complicaciones en sistemas microfluídicos, pues se puede manipular la formación, rotación-traslación y división de las burbujas y gotas. La simple configuración de T (o Y) que se emplea en estos casos ya ha sido utilizada en Cuba.²¹ Este sistema se ha usado además para el control de reacciones de síntesis de nanopartículas.[60,61]

Un comportamiento peculiar de sistemas líquido/gas en microescala es que pueden ser empleados para desplazar fluidos sin la necesidad de partes móviles. Irradiando ultrasonido es posible el empleo de la oscilación de burbujas para poner en movimiento el fluido circundante.[62] En este caso, se emplea una combinación de hoyo con un transductor piezoeléctrico oscilante en su fondo, y justo a un lado, una protuberancia rompe la simetría propiciando una dirección preferencial en el flujo (bubble-induced microstreaming = microcorrientes inducidas por burbujas). Este tipo de dispositivo puede ser empleado para romper vesículas, hacer interactuar células con medios específicos, así como para bombear fluido debido al fenómeno de microcorrientes; no requiere gradientes de presión y no hay canales que puedan obstruirse. En la siguiente figura se puede observar un caso de burbujas que tienen un diámetro de 30 μm (delineadas en blanco). Las trayectorias se hacen visibles mediante partículas fluorescentes que se mueven en la dirección indicada por la flecha.

Curiosamente con un sistema experimental similar se pueden lograr microburbujas que al ser expuestas al campo de presiones generado por el transductor pueden realizar reacciones químicas. Resulta que las burbujas al expandirse y colapsar debido al campo de presiones oscilantes funcionan como microreactores individuales en cuyo interior se alcanzan elevadas presiones (más de 1000 bar) y temperaturas (más de 15000 K) sin afectar la temperatura del líquido circundante.[63-65] Por solo mencionar una aplicación, mediante la formación de radicales libres en el interior de las burbujas se puede reducir la concentración de moléculas nocivas disueltas en el líquido y contribuir a su purificación (tratamiento de agua).

Aplicaciones biomédicas El uso de dispositivos microfluidicos en la química clínica permite realizar análisis con baja concentración de analitos sin el empleo de grandes volúmenes de reactivos costosos. Esto es conveniente en inmunoensayos, en el estudio de bibliotecas de fármacos para el descubrimiento de nuevas drogas o en el desarrollo de bibliotecas de síntesis de polímeros, o la producción de matrices de gotas orgánicas como reactores o aspectos de la circulación sanguínea.[12,30,66]

Una aplicación que podría revolucionar la forma en que se realizan los análisis de sangre (temido por muchos) es la uti-

lización de microagujas, con la consecuente disminución del dolor al extraer la muestra de sangre y de traumatismos al paciente, unido al análisis instantáneo, en el mismo dispositivo.[26]



Figura 4: Vista lateral del flujo producto de tres dobletes protuberantes (i, ii, iii). Microfotografía electrónica de protuberancia y agujero adyacente en silicio. El diámetro del agujero es de aproximadamente 30 µm. Adaptado de [62].

Es tentador pensar en la posibilidad de contar con numerosos dispositivos como el mostrado en la Figura 27 c), y en caso de alguna catástrofe o demanda masiva de medios de diagnóstico o de suministro de fármacos, poder transportarlos al lugar requerido. Este concepto se entiende como “punto de cuidado” (Point-of-care.).[6,20]

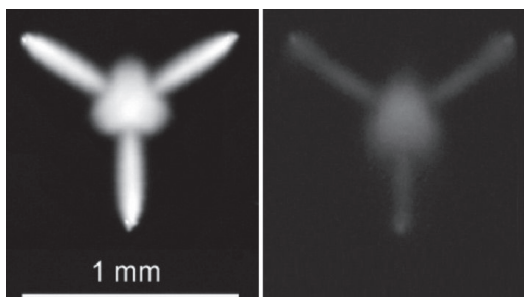


Figura 5: Evidencia de la actividad química generada por microburbujas productoras de radicales libres. Adaptado de [63].

Un ejemplo de cómo un dispositivo de microfluidos creado en una universidad ha sido comercializado eficazmente y es empleado en la actualidad es el caso de la compañía MEDIMATE <http://www.medimate.com/>. El sistema desarrollado por ellos está enfocado al “punto de cuidado” y permite analizar la concentración de litio en sangre, sodio en orina, mediante el empleo de dispositivos microfluídicos que son insertados en un lector que da al instante la concentración del analito en cuestión.[67,68]

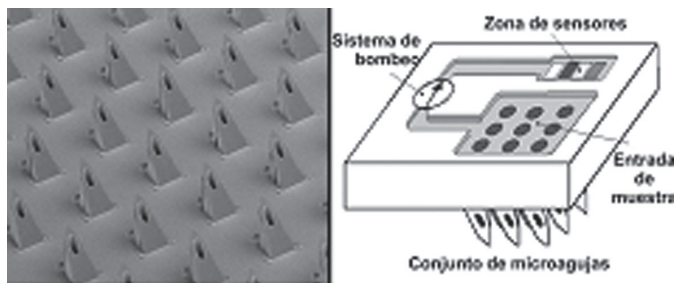


Figura 6: Arreglo de microagujas con distancia de separación de 555 µm y esquema de dispositivo. Adaptado de [26].

Los análisis de sangre para detectar la presencia de litio pueden indicar la cercanía de un ataque o recaída. La persona afecta-

da usualmente debe someterse a un análisis cuyo resultado se conoce luego de varios días y, por consiguiente, el tratamiento se retrasa y el paciente queda expuesto a un stress considerable. Disponer de un dispositivo que advierta la cercanía de una crisis sería esencial para aplicar el tratamiento oportuno.

La microfluídica ha ayudado a combatir otras enfermedades mediante microdispositivos para estudiar células de la sangre (glóbulos rojos) infectadas con el parásito *Plasmodium falciparum* causante del paludismo o la malaria.[6,69,70] En Cuba, como en tantas partes del mundo, se trata de controlar los vectores de enfermedades contagiosas como la fiebre amarilla. Se ha avanzado en materia de investigación y desarrollo de dispositivos microfluídicos que al ser portátiles pueden ser trasladados a lugares donde se quiere detectar la presencia de animales portadores. En lugar de esperar a que los enfermos lleguen a los hospitales para declarar una zona como positiva de infección, se podría realizar un monitoreo en pocos minutos y tomar medidas preventivas mucho antes de que la enfermedad se propague a otras zonas.

El concepto de los biorreactores se ha llevado a tal punto en que se emplean las células como re-actores individuales. Las células neuronales interconectadas pueden realizar operaciones de cómputo. Adicionalmente se emplean las células como reactores (concepto Laboratorio en una célula “Lab-in-a-cell”).[71,72]

Es sabido que el comportamiento de las células depende considerablemente del medio que las rodea, de modo que se puede variar las condiciones de ensayo con células (adsorción, metabolismo, excreción, toxicidad).[4,73] El proceso de apoptosis (ruptura) y necrosis (muerte) celular ha sido estudiado debido a la importancia para el descubrimiento de fármacos y procesos celulares.[74] Este proceso guarda una relación estrecha con enfermedades neurodegenerativas y el SIDA

El encapsulamiento de sustancias también ha recibido gran atención debido a las posibilidades de tratamiento de enfermedades difíciles de combatir. De esta manera se han logrado sistemas coloidales complejos que permiten la liberación y el suministro del fármaco en un lugar específico.[75] Los dispositivos microfluídicos han ayudado en la lucha contra el cáncer, por ejemplo, en la preparación de fármacos en forma de nanopartículas que pueden llegar a lugares que los medicamentos tradicionales no lo hacen.[60]

En la ingeniería de tejidos se ha demostrado la posibilidad de crecer tejidos complejos a partir del suministro constante de sangre y, por consiguiente, de oxígeno, gracias al empleo de dispositivos microfluídicos. Aún más importante es la posibilidad probada de combinar los microfluidos con la micro-y nanotecnología para desarrollar estudios fundamentales de fenómenos biológicos in vitro, lo que permitirá disponer de órganos artificiales.[76] En los estudios de toxicidad de determinadas sustancias o fármacos, se puede ahorrar tiempo, recursos y riesgos para la vida de los seres

humanos (y de animales), al reproducir de cierta manera el funcionamiento del organismo humano, y su respuesta a determinadas sustancias.[77]

En el Proyecto del Genoma Humano, la mi-crofluídica ha servido como interfaz entre la mi-croescala y la nanoescala. Por ejemplo, la electroforésis capilar en Microchip (MCE, por sus siglas en inglés) de muestras de ADN ha impulsado notablemente la velocidad de los experimentos (diagnóstico, farmacogenética, pruebas forenses y otros) y el secuenciado, el ahorro de compuestos y muestras, la automatización, así como su separación, etc.[9,20,78,79]

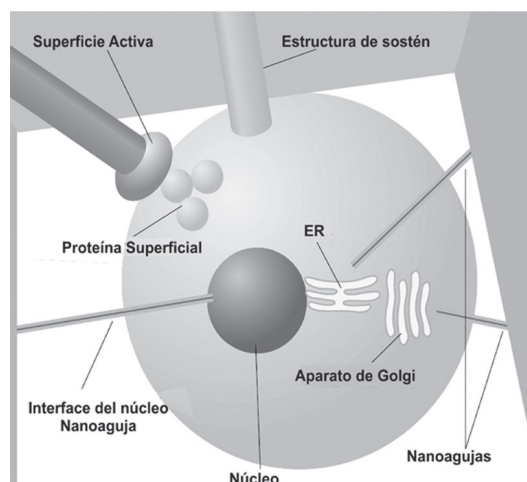


Figura 7: Dibujo conceptual del concepto Laboratorio en una célula. Adaptado de [72] .

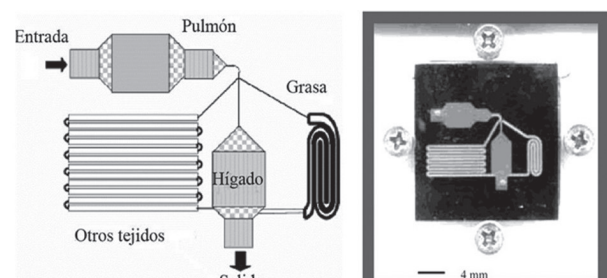


Figura 8: Esquema de conexiones de un sistema de prueba de alimentos y fotografía del dispositivo. Adaptado de [77] .

Otras aplicaciones Además de las aplicaciones mencionadas, se están empleando los microfluidos en actividades como el suministro de energía distribuida, el control térmico distribuido y las producciones químicas en gran escala (mediante el escalamiento y la paralelización de microreactores).[12]

CONCLUSIONES

El desarrollo de la microfluídica ha sido progresivo, como queda demostrado por la creciente complejidad de los dispositivos empleados y que parcialmente han sido expuestos aquí. En este sentido, ha sido vital la formación y superación gradual de personas capacitadas y en particular de grupos multidisciplinarios de científicos en numerosos centros de investigación del mundo entero. Para que en Cuba se pueda lograr algún avance en

este campo fascinante de la ciencia, es necesario aunar esfuerzos y trazar objetivos comunes entre diversos grupos a lo largo del país. Los resultados demorarían algún tiempo, pero sin dudas serían de un alto impacto en las actividades priorizadas del país. La creación de condiciones materiales para la fabricación de dispositivos de microfluidos puede ser lo mismo muy compleja (pues requiere laboratorios caros, atmósferas inertes, salas limpias -clean rooms) o extremadamente simple (empleo de impresoras láser, siliconas, jeringuillas, papel). Todo dependerá de las aplicaciones que sean factibles y necesarias para que la microfluídica pueda ser empleada con éxito en Cuba y la posibilidad de cooperación con otras instituciones foráneas. El potencial humano y nuestras tradiciones científicas heredadas son una buena combinación para lograr insertar nuestro microaporte en la microfluídica.

AGRADECIMIENTOS

La realización de este artículo no habría sido posible sin la cooperación de varios profesores y amigos entre los que no puedo dejar de mencionar a: J.G.E. Gardeniers, R. Luttge, A. Beskok, H. A. Stone, T. Thorsen, A. Felipe, F. Guzmán y A. J. Batista-Leyva.

- [1] D. Rivas. "Microfluidos:¿ cuánto hay de nuevo?" Cubana de Física, Revista 25, 142–149. ISSN 0253-9268 (2008)
- [2] R. Feynman. "There's plenty of room at the bottom." Microelectromechanical Systems, Journal of 1, 60–66. ISSN 10577157 (2002).
- [3] W. Trimmer, I. of Electrical and E. Engineers. Micromechanics and MEMS: classic and seminal papers to 1990 (IEEE press, 1997). ISBN 0780310853.
- [4] A. Manz, N. Graber and H. Widmer. "Miniaturized total chemical analysis systems: a novel concept for chemical sensing." Sensors and actuators B: Chemical 1, 244–248. ISSN 0925-4005 (1990).
- [5] H. Stone, A. Stroock and A. Ajdari. "Engineering flows in small devices." Annual Review of Fluid Mechanics 36, 381 (2004).
- [6] C. Chin, V. Linder and S. Sia. "Lab-on-a-chip devices for global health: past studies and future opportunities." Lab Chip 7, 41–57 (2006).
- [7] F. Case, P. Alexandridis, A. C. S. D. of Physical Chemistry, A. C. S. D. of Colloid, S. Chemistry and A. C. S. Meeting. Mesoscale phenomena in fluid systems (ACS Publications, 2003). ISBN 0841238677.
- [8] P. Nghe, E. Terriac, M. Schneider, Z. Li, M. Cloitre, B. Abecassis and P. Tabeling. "Microfluidics and complex fluids." Lab Chip (2011).
- [9] C. Zhang and D. Xing. "Miniaturized PCR chips for nucleic acid amplification and analysis: latest advances and future trends." Nucleic Acids Research 35, 4223. ISSN 0305-1048 (2007).
- [10] G. Whitesides. "The origins and the future of microfluidics." Nature 442, 368–373. ISSN 0028-0836 (2006).
- [11] C. Ho and Y. Tai. "Micro-electro-mechanical-systems (MEMS) and fluid flows." Annual Review of Fluid Mechanics 30, 579–612. ISSN 0066-4189 (1998).
- [12] H. Stone and S. Kim. "Microfluidics: basic issues, applications, and challenges." AIChE Journal 47, 1250–1254. ISSN 1547-5905 (2001).
- [13] G. Whitesides and A. Stroock. "Flexible methods for microfluidics." Physics Today 54, 42 (2001).
- [14] J. Voldman, M. Gray and M. Schmidt. "Microfabrication in biology and medicine." Annual review of biomedical engineering 1, 401–425. ISSN 1523-9829 (1999).
- [15] J. Desai and I. Banat. "Microbial production of surfactants and their commercial potential." Microbiology and Molecular Biology Reviews 61, 47. ISSN 1092-2172 (1997).
- [16] A. Martinez, S. Phillips, G. Whitesides and E. Carrilho. "Diagnostics for the developing world: microfluidic paper-based analytical devices." Analytical chemistry 82, 3–10. ISSN 00032700 (2009).
- [17] L. Collins. "You ain't seen nothin'yet." Engineering & Technology 5, 64–65. ISSN 1750-9637 (2010).

- [18] B. Weigl, G. Domingo, P. LaBarre and J. Gerlach. "Towards non-and minimally instrumented, microfluidics-based diagnostic devices." *Lab on a Chip* 8, 1999 (2008).
- [19] A. Kamholz, B. Weigl, B. Finlayson and P. Yager. "Quantitative analysis of molecular interaction in a microfluidic channel: the T-sensor." *Anal. Chem* 71, 5340–5347 (1999).
- [20] P. Yager, T. Edwards, E. Fu, K. Helton, K. Nelson, M. Tam and B. Weigl. "Microfluidic diagnostic technologies for global public health." *Nature* 442, 412–418. ISSN 0028-0836 (2006).
- [21] A. Reyes. "Modelación y estudio experimental del flujo de slug en microreactores capilares." Tesis de Diploma, In-STECH, Cuba (2010).
- [22] D. Mijatovic, J. Eijkel and A. Berg. "Technologies for nanofluidic systems: top-down vs. bottom-up *Lab on a Chip* 5, 492–500. ISSN 1473-0197 (2005).
- [23] N. Nguyen and S. Wereley. *Fundamentals and applications of microfluidics* (Artech House Publishers, 2002). ISBN 1580533434.
- [24] M. Madou. *Fundamentals of microfabrication: the science of miniaturization* (CRC, 2002). ISBN 0849308267.
- [25] G. Kovacs. "Micromachined transducers sourcebook" New York, NY (1998).
- [26] H. Gardeniers, R. Luttge, E. Berenschot, M. de Boer, S. Yeshurun, M. Hefetz, R. Van't Oever and A. Van Den Berg. "Silicon micromachined hollow microneedles for transdermal liquid transport." *Microelectromechanical Systems, Journal of* 12, 855–862. ISSN 1057-7157 (2004).
- [27] J. Gardeniers and A. Berg. "Micro-and nanofluidic devices for environmental and biomedical applications." *International Journal of Environmental Analytical Chemistry* 84, 809–819. ISSN 0306-7319 (2004).
- [28] D. Reyes, D. Iossifidis, P. Aurox and A. Manz. "Micro total analysis systems. 1. Introduction, theory, and technology." *Anal. Chem* 74, 2623–2636 (2002).
- [29] P. Aurox, D. Iossifidis, D. Reyes and A. Manz. "Micro total analysis systems. 2. Analytical standard operations and applications." *Anal. Chem* 74, 2637–2652 (2002).
- [30] I. Dimov, L. Basabe-Desmonts, J. Garcia-Cordero, B. Ross, A. Ricco and L. Lee. "Stand-alone self-powered integrated microfluidic blood analysis system (SIMBAS)." *Lab Chip* (2010).
- [31] C. Meinhart, S. Wereley and J. Santiago. "PIV measurements of a microchannel flow." *Experiments in Fluids* 27, 414–419. ISSN 0723-4864 (1999).
- [32] C. Snoeyink and S. Wereley. "A Novel 3 Dimension 3 Component Micro-PIV System." *Bulletin of the American Physical Society* 55 (2010).
- [33] P. Paul, M. Garguilo and D. Rakestraw. "Imaging of pressure-and electrokinetically driven flows through open capillaries." *Anal. Chem* 70, 2459–2467 (1998).
- [34] A. van der Meer, K. Vermeul, A. Poot, J. Feijen and I. Vermees. "Flow cytometric analysis of the uptake of low-density lipoprotein by endothelial cells in microfluidic channels." *Cytometry Part A* 77, 971–975. ISSN 1552-4930 (2010).
- [35] O. Krasnykov, A. Karabchevsky, A. Shalabney, M. Auslender and I. Abdulhalim. "Sensor with increased sensitivity based on enhanced optical transmission in the infrared." *Optics Communications* ISSN 0030-4018 (2010).
- [36] K. Nichols and H. Gardeniers. "A digital microfluidic system for the investigation of pre-steady-state enzyme kinetics using rapid quenching with MALDI-TOF mass spectrometry." *Anal. Chem* 79, 8699–8704 (2007).
- [37] L. Chen and J. Choo. "Recent advances in surface-enhanced Raman scattering detection technology for microfluidic chips." *Electrophoresis* 29, 1815–1828. ISSN 1522-2683 (2008).
- [38] S. Firebaugh, K. Jensen and M. Schmidt. "Miniaturization and integration of photoacoustic detection with a microfabricated chemical reactor system." *Microelectromechanical Systems, Journal of* 10, 232–237. ISSN 1057-7157 (2002).
- [39] W. De Malsche, H. Eghbali, D. Clicq, J. Vangelooen, H. Gardeniers and G. Desmet. "Pressure-driven reverse-phase liquid chromatography separations in ordered nonporous pillar array columns." *Anal. Chem* 79, 5915–5926 (2007).
- [40] N. Vervoort, J. Billen, P. Gzil, G. Baron and G. Desmet. "Importance and reduction of the sidewall-induced band-broadening effect in pressure-driven microfabricated columns." *Anal. Chem* 76, 4501–4507 (2004).
- [41] K. Yea, S. Lee, J. Kyong, J. Choo, E. Lee, S. Joo and S. Lee. "Ultra-sensitive trace analysis of cyanide water pollutant in a PDMS microfluidic channel using surface-enhanced Raman spectroscopy." *The Analyst* 130, 1009–1011. ISSN 0003-2654 (2005).
- [42] J. Bart, A. Kolkman, A. Oosthoek-de Vries, K. Koch, P. Nieuwland, H. Janssen, J. van Bentum, K. Ampt, F. Rutjes, S. Wijmenga et al. "A microfluidic high-resolution NMR flow probe." *Journal of the American Chemical Society* 131, 5014–5015. ISSN 0002-7863 (2009).
- [43] G. Moresi and R. Magin. "Miniature permanent magnet for table-top NMR." *Concepts in Magnetic Resonance Part B: Magnetic Resonance Engineering* 19, 35–43. ISSN 1099-0534 (2003).
- [44] T. Thorsen, S. Maerkl and S. Quake. "Microfluidic large-scale integration." *Science* 298, 580 (2002).
- [45] J. Burns and C. Ramshaw. "The intensification of rapid reactions in multiphase systems using slug flow in capillaries." *Lab on a Chip* 1, 10–15. ISSN 1473-0197 (2001).
- [46] B. Ahmed-Omer, J. Brandt and T. Wirth. "Advanced organic synthesis using microreactor technology." *Organic & Biomolecular Chemistry* 5, 733–740. ISSN 1477-0520 (2007).
- [47] J. Wood. "Microreactor speeds synthesis of molecular probe: Microfluidics." *Nano Today* 1, 13. ISSN 1748-0132 (2006).
- [48] C. Lee, G. Sui, A. Elizarov, C. Shu, Y. Shin, A. Dooley, J. Huang, A. Daridon, P. Wyatt, D. Stout et al. "Multistep synthesis of a radiolabeled imaging probe using integrated microfluidics." *Science* 310, 1793 (2005).
- [49] A. Amor Coarasa, A. Xiquez Castillo and J. Morin Zorrilla. "Preliminary work for construction of a ⁶⁸Ge/⁶⁸Ga radioisotopic generator for medical use in positron emission tomography." *Cuban Chemistry Magazine* 1 (2007).
- [50] A. Amor Coarasa. "Generador ⁶⁸Ge/⁶⁸Ga." Tesis de Maestría, In-STECH, Cuba (2007).
- [51] Z. Stone and H. Stone. "Imaging and quantifying mixing in a model droplet micromixer." *Physics of Fluids* 17, 063103 (2005).
- [52] V. Taly, B. Kelly and A. Griffiths. "Droplets as Microreactors for High-Throughput Biology." *ChemBioChem* 8, 263–272. ISSN 1439-7633 (2007).
- [53] B. Dollet, W. van Hoeve, J. Raven, P. Marmottant and M. Versluis. "Role of the channel geometry on the bubble pinch-off in flow-focusing devices." *Physical review letters* 100, 34504. ISSN 1079-7114 (2008).
- [54] A. Bouakaz, M. Versluis and N. de Jong. "High-speed optical observations of contrast agent destruction." *Ultrasound in medicine & biology* 31, 391–399. ISSN 0301-5629 (2005).
- [55] M. Kashid, D. Fernandez Rivas, D. Agar and S. Turek. "On the hydrodynamics of liquid-liquid slug flow capillary microreactors." *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering* 3, 151–160. ISSN 1932-2143 (2008).
- [56] H. Song, J. Tice and R. Ismagilov. "A microfluidic system for controlling reaction networks in time." *Angewandte Chemie* 115, 792–796. ISSN 1521-3757 (2003).
- [57] M. Kashid, D. Agar and S. Turek. "CFD modelling of mass transfer with and without chemical reaction in the liquid-liquid slug flow microreactor." *Chemical Engineering Science* 62, 5102–5109. ISSN 0009-2509 (2007).
- [58] D. Fernandez Rivas, M. Kashid, D. Agar and S. Turek. "A microfluidic system for controlling reaction networks in time." *African Physical Review* 1, 9–11. ISSN 1970-4097 (2007).
- [59] J. Rodríguez Ramos. "Modelación numérica de microreactor bifásico líquido-líquido de canal alargado con reacción química de primer orden." Tesis de Maestría, InSTECH, Cuba (2007).
- [60] F. Gu, R. Karnik, A. Wang, F. Alexis, E. Levy-Nissenbaum, S. Hong, R. Langer and O. Farokhzad. "Targeted nanoparticles for cancer therapy." *Nano Today* 2, 14–21. ISSN 1748-0132 (2007).
- [61] T. Thorsen, R. Roberts, F. Arnold and S. Quake. "Dynamic pattern formation in a vesicle-generating microfluidic device." *Physical Review Letters* 86, 4163–4166. ISSN 1079-7114 (2001).
- [62] P. Marmottant, J. Raven, H. Gardeniers, J. Bomer and S. Hilgenfeldt. "Microfluidics with ultrasound-driven bubbles." *Journal of fluid mechanics* 568, 109–118. ISSN 0022-1120 (2006).
- [63] D. Fernandez Rivas, A. Prosperetti, A. G. Zijlstra, D. Lohse and H. J. G. E. Gardeniers. "Efficient Sonochemistry through Microbubbles Generated with Micromachined Surfaces." *Angewandte Chemie International Edition* 49, 9699–9701. ISSN 1521-3773 (2010).
- [64] D. Lohse. "Sonoluminescence -Cavitation hots up." *Nature* 434, 33–34. ISSN 0028-0836 (2005).
- [65] K. Suslick and D. Flannigan. "Inside a collapsing bubble: Sonoluminescence and the conditions during cavitation." *Physical Chemistry* 59, 659 (2008).

- [66] I. Takeuchi, J. Lauterbach and M. Fasolka. "Combinatorial materials synthesis." *Materials Today* 8, 18–26. ISSN 1369-7021 (2005).
- [67] E. Vrouwe, R. Luttge, I. Vermes and A. van den Berg. "Microchip capillary electrophoresis for point-of-care analysis of lithium." *Clinical chemistry* 53, 117 (2007).
- [68] S. Staal, J. Floris, S. Lenk, A. Munoz, D. Kohlheyer, J. Eijkel and A. van den Berg. "A prefilled, ready-to-use, electrophoresis-based lab-on-a-chip device for monitoring ions in blood and urin." 14th International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences, μ TAS 2010, Groningen, 2107–2109 ISSN 1556-5904 (2010).
- [69] J. Shelby, J. White, K. Ganesan, P. Rathod and D. Chiu. "A microfluidic model for single-cell capillary obstruction by *Plasmodium falciparum*-infected erythrocytes." *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 100, 14618 (2003).
- [70] H. Bow, I. Pivkin, M. Diez-Silva, S. Goldfless, M. Dao, J. Niles, S. Sureshb and J. Han. "A microfabricated deformability-based flow cytometer with application to malaria." *Lab on a Chip* ISSN 1473-0189 (2011).
- [71] M. M. Maharbiz, W. J. Holtz, R. T. Howe and J. D. Keasling. "Microbio-reactor arrays with parametric control for high-throughput experimentation." *Biotechnology and Bioengineering* 85, 376–381. ISSN 1097-0290 (2004).
- [72] H. Andersson and A. van den Berg. "Microtechnologies and nanotechnologies for single-cell analysis." *Current opinion in biotechnology* 15, 44–49. ISSN 0958-1669 (2004).
- [73] J. Pihl, J. Sinclair, M. Karlsson and O. Orwar. "Microfluidics for cell-based assays." *Materials today* 8, 46–51. ISSN 1369-7021 (2005).
- [74] A. Valero, F. Merino, F. Wolbers, R. Luttge, I. Vermes, H. Andersson and A. Berg. "Apoptotic cell death dynamics of HL60 cells studied using a microfluidic cell trap device." *Lab on a Chip* 5, 49–55. ISSN 1473-0197 (2005).
- [75] T. Nisisako, S. Okushima and T. Torii. "Controlled formulation of monodisperse double emulsions in a multiple-phase microfluidic system." *Soft Matter* 1, 23–27. ISSN 1744-683X (2005).
- [76] H. Andersson and A. Berg. "Microfabrication and microfluidics for tissue engineering: state of the art and future opportunities." *Lab on a Chip* 4, 98–103. ISSN 1473-0197 (2004).
- [77] K. Viravaidya, A. Sin and M. L. Shuler. "Development of a Microscale Cell Culture Analog To Probe Naphthalene Toxicity." *Biotechnology Progress* 20, 316–323. ISSN 1520-6033 (2004).
- [78] M. Mohamadi, L. Mahmoudian, N. Kaji, M. Tokeshi, H. Chuman and Y. Baba. "Nanotechnology for genomics & proteomics." *Nano Today* 1, 38–45. ISSN 1748-0132 (2006).
- [79] C.-F. Chou, O. Bakajin, S. W. P. Turner, T. A. J. Duke, S. S. Chan, E. C. Cox, H. G. Craighead and R. H. Austin. "Sorting by diffusion: An asymmetric obstacle course for continuous molecular separation." *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 96, 13762–13765 (1999).

A 20 AÑOS DE LA PRIMERA MÁQUINA DE RESONANCIA MAGNÉTICA DE IMÁGENES CUBANA: UN PROYECTO DE INGENIERÍA FÍSICA Y BIOFÍSICA

C. CABAL

Centro de Ingeniería Genética y Biotecnología, La Habana, Cuba; carlos.cabal@cigb.edu.cu

Se describen los antecedentes, los resultados y los impactos científicos, tecnológicos y sociales del proyecto cubano de construcción de equipos de imágenes de Resonancia Magnética. Se afirma que las Universidades son las instituciones científicas y académicas con las mejores condiciones para empeños multidisciplinarios. Se concluye que para los países subdesarrollados, es vital encontrar vías y alternativas concretas para que se establezcan nexos, eficaces y perdurables, entre las diversas ramas de la Física y el quehacer científico y tecnológico de nuestros tiempos de acuerdo a las prioridades del país.

The premises, results and scientific, technological and social impacts of the Cuban whole-body Magnetic Resonance Machine project, are discussed. It is concluded that the Universities are excellent scenarios to develop such high-impact, multi-disciplinary projects. In developing countries it is essential to find ways and alternatives to establish tight, strong and durable links between physics and technology, resulting in economic outputs according to each country's priorities.

Palabras Clave. Ingeniería Física, Biofísica, Resonancia Magnética.

ANTECEDENTES

En diciembre de 1987 comenzó un proyecto de Ingeniería Física y Biofísica en la Facultad de Física-Matemática de la Universidad de Oriente (UO). Éste respondía a una solicitud del Presidente de los Consejos de Estado y de Ministros Comandante en Jefe Dr. Fidel Castro Ruz, quien preocupado por la introducción de tecnologías de avanzadas para la salud, meses antes se había interesado en la posibilidad de construir en Cuba equipos de Resonancia Magnética de Imágenes (RMI) para el diagnóstico médico. Muchas de las firmas productoras de estos equipos se veían imposibilitadas de suministrar esa tecnología a Cuba por el Bloqueo del gobierno de los Estados Unidos de Norteamérica. Días antes de iniciar el proyecto éste me parecía inviable por su complejidad y por ejecutarse en un país del tercer Mundo. Fue la convicción y la confianza de Fidel, y el compromiso con él y con la ciencia cubana, un factor de éxito innegable. Las convicciones, el sentido común y práctico, la imaginación, unidas al conocimiento de la física de la Resonancia Magnética (RM) fueron pilares valiosos [1,2].

El proyecto tenía como antecedentes el grupo de RM de la Facultad de Física-Matemática de la UO surgido en el año 1975, después de un fructífero curso de postgrado impartido por el Prof. Dr. P.M. Borodin de la Facultad de Física de la Universidad de Leningrado (UL). En aquel año 1975 se definieron dos líneas de trabajo en RMN: La primera, el estudio de la madurez de la caña de azúcar con RM buscando un procedimiento generalizable a la industria cubana.

Se logró por el Ing. Físico Arturo Guzmán Carmenate, de la primera graduación (1970) de la UO, registrar la señal de RM de la caña de azúcar en el campo magnético de la Tierra ($5.10^{-5}T$) midiéndose los tiempos de relajación magnética en función de la madurez de la caña.

La segunda línea que se identificó fue la investigación de complejos paramagnéticos de Ni (II) y Co (II) en soluciones, tema vinculado a mediano plazo con la industria del Níquel, en la que Cuba ocupa un lugar destacado. Así desde el origen, la RM estuvo direccionada a la solución de problemas prácticos del país. En esta segunda línea se defiende la Tesis de doctorado de C. Cabal "Mecanismos de Relajación Magnética en soluciones acuosas paramagnéticas de Ni (II) y Co (II)" bajo la tutoría del Dr V.I. Chizhik, en la Facultad de Física de la UL el 18 de septiembre de 1980 (el mismo día que voló el 1er cosmonauta cubano). Los trabajos desarrollados en el marco de esta tesis recibieron el 2do y 1er Lugar del Concurso de Jóvenes Científicos de toda la UL en los años 79 y 80, respectivamente.

Entre los años 1980 y 1987 se consolida el laboratorio de RM de la UO con instalaciones experimentales diseñadas y construidas en la Facultad, se intensifica la formación de los especialistas (con el apoyo de la URSS) y se realizan investigaciones de la micro estructura y los procesos de relajación magnética de las soluciones paramagnéticas de iones de metales de transición y de Lantánidos como el Ce (III), Sm (III), Pr (III),

Tb (III), Eu (III)[3-5]. A la investigación de los Lantánidos con RM se incorpora también el físico Arturo Guzmán. Sin embargo, su muerte en un accidente automovilístico impide que culmine su tesis de doctorado y que pueda disfrutar del proyecto que se avecinaba. Este laboratorio a pesar de sus escasos recursos acometió investigaciones en la cinética del fraguado del cemento[6] y la lixiviación de el Co (III) en medio carbonato amoniacal de la planta Rene Ramos de Nicaro[7] y se destacó en el contexto de la UO mereciendo varios los Premios anuales Al Merito Científico Técnico.

Durante la década de 1970, se habían realizado en Cuba dos proyectos de alto impacto tecnológico: la fabricación de las minicomputadoras cubanas de la serie CID y equipos médicos cubanos, entre otros, de neurofisiología y cardiología instalados en múltiples instituciones. Ellos dejaron la “atmósfera del ejemplo”, mostraron la real posibilidad de acometer empresas de complejas tecnologías. La concepción y realización parcial del Polo científico del Oeste de La Habana también fue una premisa sin la cual un proyecto como el nuestro no hubiese sido viable. Acercarse a ese rasero de realizaciones y de formas de pensar y actuar en la ciencia, siempre fue un reto para el proyecto de la UO.

EL PROYECTO

Cuando surge el proyecto de la Facultad Fisica-Matemática de la UO, se produce un cambio en el trabajo: la RMN se orienta hacia la biomedicina, y más que todo, se profundiza en las concepciones de la creación científica; su razón de ser y el ritmo de las investigaciones, el papel de la ciencia y de cómo y hasta donde debía llevarse un resultado científico. La esencia del proyecto iba más allá de la física experimental, era un programa físico tecnológico. Por ello en su grupo inicial de 12 profesionales y técnicos (la mayoría jóvenes y estudiantes) si bien predominaban los físicos, también había un número significativo de ingenieros electrónicos y se contaba con la colaboración de dos ingenieros mecánicos de otras instituciones. Aprendimos en la práctica que el carácter multidisciplinario y la cooperación institucional son factores que acrecientan la probabilidades de éxito de un proyecto con proyección económica y social. No existen instituciones científicas y académicas con mejores condiciones que las Universidades para empeños multidisciplinarios. Sin embargo, sus estructuras clásicas son muchas veces impedimentas para ello. Los estudiantes universitarios demostraron que pueden ser participantes activos y fecundos de proyectos de elevada complejidad y alto compromiso.

Desde el inicio el proyecto se concibió por etapas. Nos parecía de muy alto riesgo acometer el objetivo final de una vez. Había que probar, para nosotros y el contexto, nuestras capacidades. La primera etapa tuvo como propósito: a) Diseñar, construir y caracterizar los parámetros de un relaxómetro universal de RM para la medición de manera computarizada de los tiempos de relajación spin retículo (T1) y spin spin (T2) con las diferentes secuencias de pulsos de radiofrecuencia existentes en aquel entonces. (ver Figura 1). b) Identificar

problemas biomédicos de impacto que pudieran abordarse con RM. c) Estudiar las vías concretas para calcular, diseñar y construir un equipo de RMI para estudios de cuerpo completo en humanos. En esencia estas tres tareas de la primera etapa fueron cumplidas a los 7 meses en julio del 1988.



Figura 1. Vista general del relaxómetro de Resonancia Magnética cubano Giromag.

Varios de los problemas científicos y de salud identificados en aquel entonces (por ejemplo la determinación de la cinética de la polimerización de la hemoglobina S en pacientes drepanocíticos y el grado de malignidad de los tumores) constituyen líneas de trabajo de instituciones científicas del país.

La segunda etapa consistió en el cálculo, el diseño, la construcción, la puesta en marcha y caracterización de todos y cada uno de los sistemas que constituyen un equipo de RM de imágenes:

Sistema magnético que incluía el electroimán, su alimentación, el enfriamiento, las bobinas activas y dispositivos pasivos de corrección de la homogeneidad del campo magnético. Era imprescindible desarrollar los equipos y procedimientos para caracterizar la intensidad, la estabilidad y homogeneidad del campo magnético de algunas partes por millón en un volumen de esfera de 40 cm de diámetro. Hubo que enfrentar cálculos electromagnéticos complejos de sistemas reales con circuitos de corrientes de 5 Km de longitud con alambres de 75 mm² de sección, de toneladas de peso y con disipación de calor de varios KW. (ver Figura2).

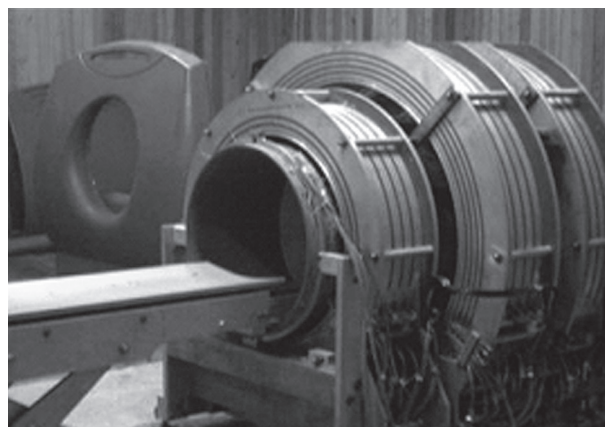


Figura 2. Electroimán diseñado, construido y caracterizado como parte de los equipos cubanos Giromag.

Sistema de Gradientes de campos magnéticos con amplificadores de pulsos de corrientes del orden de varias decenas de amperes y tiempos de crecimiento de unas decimas de milisegundos y duración de varios milisegundos sobre las bobinas correspondientes con inductancias de centenares de micro henrios para garantizar la codificación espacial lineal en los tres ejes ortogonales en la región de interés.

Sistema de generación, modulación y amplificación de los pulsos de radiofrecuencia de potencias del orden de los KW y duraciones de los milisegundos, así como las bobinas para producir la excitación para cada una de las partes del cuerpo humano a las frecuencias necesarias.

Sistema de recepción y detección de la señal de radiofrecuencia con la bobina donde se inducen *fem* de a penas algunas decenas de micro voltios un rango relativamente amplio de frecuencias con un elevado nivel de ruido.

Sistema de digitalización de la señales detectadas, la transformada rápida de Fourier bidimensional, la formación de los perfiles y las imágenes de RM. Todo ello en base a la tecnología de computo existente y disponible en aquellos momentos: computadoras personales (PC) 8086. El desarrollo del software (alto y bajo nivel), los problemas de control y comunicación de las PCs entre sí y con el resto de los sistemas, el manejo de los recursos informáticos para atender el control, realizar los cálculos, formar la imagen fueron si dudas también tareas de mucha complejidad.

Sistema de control y sincronismo de todos los eventos que garantizaban la programación de las secuencias de pulsos necesarias para obtener la información codificada, espacial y temporalmente, en el objeto bajo estudio y la estabilidad de fase entre sí de cada uno de los otros bloques mencionados.

Sistema de presentación, procesamiento y evaluación de las imágenes de RM con un software totalmente creado en el proyecto.

Solo con una profunda comprensión física e ingenieril podían realizarse los cálculos electromagnéticos (problema directo e inverso del electromagnetismo), los mecánicos, electrónicos, termodinámicos, llevarlos a un diseño viable con la tecnología disponible en el país.

Para comprobar sus parámetros, para la determinación de las funciones de transferencia de los distintos bloques y del sistema en su conjunto, para que se cumplieran las regulaciones y normativas internacionales hubo también que calcular, diseñar, construir equipos y procedimientos de mediciones. Se construyó y calibró un magnetómetro de RM, varios phantom, dispositivos electrónicos para la medición de los pulsos de gradientes de campos magnéticos, de RF, etc. que permitieran ir evaluando los parámetros de los bloques construidos por parte y garantizar la calidad de toda la máquina de RM. (Ver figuras 3 y 4).

En agosto de 1991, a tres años y un mes desde el comienzo de la 2da etapa, se obtenían imágenes del sistema nervioso central y las extremidades del cuerpo humano con un equipo de RM totalmente cubano.

El proyecto contó con la valiosa cooperación de múltiples instituciones, entre ellas: el ICID, CNIC, Retomed, el CAI "Los Reinaldos" y la Fundación escultórica "El Caguayo". El Prof. Eugenio Selman Housein Abdo, destacado cirujano cubano, fue un impulsor, critico y consejero valioso del proyecto. El Dr. H. C. Panepucchi; quién nos visitó ya avanzado el proyecto; fue de una ayuda inestimable y puso su laboratorio del Instituto de Física de la Universidad de Sao Pablo, Brasil a nuestra disposición para completar la formación de algunos de nuestros especialistas.



Figura 3. Vista general de los bloques electrónicos diseñados y construidos para los equipos de Imágenes de Resonancia Magnética cubanos Girolmag

SOBRE EL RESULTADO Y SU IMPACTO

Desde el inicio mismo, cuando se concibió el proyecto, se pensó en que de tener éxito, éste sería la génesis de un centro de investigaciones de física aplicada, física técnica y biofísica dentro de la UO. El propósito de una física técnica y biofísica estuvo latente desde el surgimiento mismo de la física en el oriente del país y fue enarbolado durante décadas por el Dr. Roberto Soto del Rey, fundador de la Física en la UO en 1947 [8].

En Octubre de 1991, unos meses después que la máquina RMI estuviera funcionando se tomaron dos decisiones muy trascendentes: 1) Trasladar, montar y poner en servicio el equipo construido para el Hospital General J. Bruno Zayas de Santiago de Cuba. 2) Edificar el Centro de Biofísica Médica (CBM) de la UO, terminado en un año exacto e inaugurado el 10 de febrero de 1993 por Fidel Castro Ruz. Aquel día él, en un ejemplar de su libro "La Historia me absolverá" escribió: "*Para el Centro de Biofísica Médica, de Santiago de Cuba, orgullo no solo de la Ciudad Héroe sino de toda la patria. Felicidades y a forjar nuevos sueños, hermosas realidades de mañana*".

No obstante, la carga elogiosa de estas palabras, su fundamental contenido fue de compromiso para el colectivo ya que en aquel momento formuló de manera concreta una idea que constituye un reto para la ciencia y las tecnologías cubanas

“La ciencia y las producciones de la ciencia deben ocupar, algún día, el primer lugar de la economía nacional. Tenemos que desarrollar las producciones de la inteligencia. Ese es nuestro lugar en el mundo, no habrá otro. En eso podemos discutir con los Japoneses, con los alemanes.”

Este proyecto ha sido catalogado por varios destacados científicos como uno de los proyectos de más envergadura. A continuación se describen sus impactos más importantes resumibles en tres grupos: tecnológicos, científicos y sociales.

En plano tecnológico. La principal contribución ha sido demostrar la factibilidad de la construcción de diversos tipos de equipos de RM, con una calidad creciente y cumpliendo las exigencias normativas mundiales[9]. Se trata de una tecnología del primer mundo, dentro de las más complejas del diagnóstico médico. El monto total de dinero empleado para su desarrollo del GiroImag 01 (unos 120 mil USD para adquisición de equipos e instrumentos complementarios, componentes, materiales, y otros insumos) fue casi un orden de magnitud menor que el precio que tenía un equipo en el mercado mundial.

Alrededor de este proyecto cubano, y como parte de la asimilación tecnológica, se impulsaron tecnologías que nos ponen en condiciones de acometer empresas de igual o mayor alcance, y de darle continuidad al desarrollo que se gesta en el mundo de esta y otras especialidades conexas.

En este proceso creador de asimilación tecnológica, además de haberse identificado nuevas y autóctonas líneas de investigación, han existido algunas contribuciones originales, sobre todo en el uso de las microcomputadoras (el hardware y el software) para el gobierno de los equipos de RM y el procesamiento de la información que se obtiene en los equipos, en algunos bloques electrónicos singulares con nuevas tecnologías, y en los procedimientos y algoritmos de cálculos de configuraciones electroimanes y bobinas de gradientes de campos[10], entre otros.

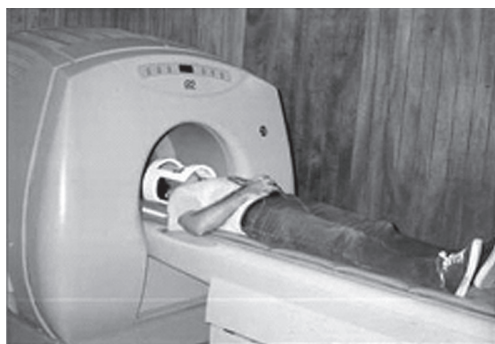


Figura 4. GiroImag 03 en el Hospital L. Iñiguez de Holguín.

En el plano científico. Cabe referirse a la contribución que se ha hecho en el campo de las aplicaciones de la RM. En particular, el estudio con enfoque Biofísico y sistémico (desde el nivel molecular al de organismo) de la Anemia de Eritrocitos Falciformes o Sicklemia[11-13].

Esta enfermedad de origen genético, procedente del África, está relacionada con una alteración en la hemoglobina, que conlleva a la deformación de los glóbulos rojos (su microviscosidad, la permeabilidad y elasticidad de la membrana, la anisotropía de la susceptibilidad magnética) y con ello a modificaciones de la hemodinámica y de procesos fisiológicos, que conducen a un deterioro intenso y progresivo de los enfermos, y que mueren por lo general en edades muy tempranas.

En el mundo, por datos de la Organización Mundial de la Salud, se estima que el número de portadores de la enfermedad sobrepase la cifra de decenas de millones, y afecta a todos los países hacia donde ha existido emigración africana.

En esta dirección los aportes cubanos son de alto impacto científico y social. Basado en los equipos cubanos de relaxometría de RM, se ha establecido una nueva metodología diagnóstica que relaciona parámetros moleculares con el estado de los sicklémi- cos, que además de contribuir a predecir las crisis de éstos, permite evaluar la efectividad de los esquemas terapéuticos[11-15]. Ella se basa en los estudios de la cinética de la polimerización de la hemoglobina S en condiciones de baja oxigenación. Nuevos modelos físico matemáticos para describir analíticamente estos procesos y predecir las condiciones bajo las cuales se puede enlentecer la polimerización han sido publicados como resultado de las investigaciones desarrolladas[11-17].

Por otra parte, se dispone, de un nuevo candidato a fármaco, no tóxico, que ha probado su eficacia como paliativo en el tratamiento de la enfermedad. Todo ello redundará en la calidad de vida de los mismos.

Resultados del proyecto han tenido varios reconocimientos nacionales e internacionales entre los que destacan dos *Premios de la Academia de Ciencia de Cuba* (1994 y 1995), seis en el *Foro Nacional de Ciencia y Técnica* (1994-1998), el *Fist Prize Giorgio Alberi in Memoriam in the V International Conference on Applications of Physics in Medicine and Biology, Trieste, Italy, 1996* y *Premios Nacionales de Salud* (2002, 2007, 2009).

En el plano social. Las decenas de miles de pacientes diagnosticados con los equipos cubanos de RMI, en los más de diez años que estuvieron funcionando en varios hospitales cubanos, ha sido el más evidente de los aportes sociales. Se trata de vidas salvadas y de tranquilidad generada a seres humanos. Este es el más incommensurable reconocimiento.

El apogeo de la RM y la creación del CBM ocurren en los años difíciles de la economía cubana, no obstante, la voluntad nacional y la de los científicos, hizo posible mostrar logros modestos, semillas de nuevos desarrollos científicos y tecnológicos.

Es destacable que del proyecto salieron investigadores de muy elevado nivel profesional. Adolfo Fernández, Evelio Gonzalez, Alejandro Bordelois, Juan C. Garcia y Héctor Sánchez físicos e ingenieros, todos hoy doctores, fueron pilares en el proyecto. A inicios de los años ochenta sólo existían dos laboratorios de RM

con apenas cinco investigadores. El impulso a la RM constituyó sin lugar a dudas una explosión en la formación de especialistas de ramas diversas como la física, la medicina, la electrónica, la computación, la química, y otras. Se cuentan por decenas los estudiantes de pre y postgrado que han estado vinculados a nuestros laboratorios.

EPÍLOGO

El proyecto descrito conllevó a un centro de investigaciones con más de una decena de otros proyectos de alto impacto. Sin embargo, después de 15 años se discontinuó la parte relacionada con la construcción de equipos RMI cubanos por factores diversos, cuyo análisis requiere de un mayor espacio.

Las formas de interrelación entre las investigaciones básicas y las tecnológicas; y los vínculos efectivos de la actividad universitaria con la producción, y con los usuarios de los resultados científicos en la sociedad fueron enseñanzas del proyecto. El factor cultural y organizativo, frecuentemente, tiene una dimensión determinante en el éxito de los proyectos.

La brecha mayor entre el desarrollo y el sub desarrollo, más que en campo de los conocimientos, está en la capacidad de convertir los conocimientos en tecnologías viables, de calidad creciente, que a la vez que eleven y se imbriquen en la cultura de la nación, tengan un impacto en la economía y la sociedad.

Para los países subdesarrollados, es vital encontrar las vías y alternativas concretas para que se establezcan nexos, eficaces y perdurables, entre las diversas ramas de la Física y el quehacer científico y tecnológico de nuestros tiempos. No se puede ir por los mismos caminos de los que van delante. A la vez que se asimile inteligentemente todo el acervo científico y tecnológico mundial, a través de la transferencia y asimilación de tecnología; se deben potenciar también las ramas de las ciencias básicas; que sean coherentes con la estrategia, de manera de ir estableciendo bases para una Física oriunda, que aporte al patrimonio científico universal y responda a los intereses de nuestros país.

La formación perenne de los especialistas, de nivel y con enfoques correctos del papel de la física, estructurar proyectos de investigaciones físico tecnológicas y propiciar el desarrollo de tecnologías autóctonas, son algunos de los elementos indispensables para mantenernos dentro de la modernidad y afianzar la imprescindible soberanía tecnológica.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mis profesores y alumnos. Mi gratitud para Fidel Castro Ruz, por haber planteado el reto y haber sido la principal fuente de motivación, a Eugenio Selman Housein

Abdo, Carlos Gutierrez Calzado, Fernando Arrojas Cowley, Michel Valdés Sosa, Carlos Rodriguez Castellanos, Manuel Limonta Vidal, Luis Herrera Martínez, José Carlos Ugarte, Orlando Valls Pérez, Maria Garcia Alvarez, Alberto Lescay Merencio por haber creído y apoyado el proyecto. A Santiago de Cuba. A todos los que participaron.

- [1] C. Cabal y colectivo de autores, "Y sin embargo Ciencia", pp. 56 – 66. (Editora Abril, 1999).
- [2] C. Cabal y colectivo de autores: "Biofísica Médica" en Cuba Amanecer del Tercer Milenio. Ciencia, Sociedad y Tecnología, pp. 31- 48 (Editorial Debate, España, 2002).
- [3] C. Cabal, V.I. Chizhik, "Study of molecular motion and microstructure of hydrate shells of Nickel(II) and Cobalt(II) ions by the NMR relaxation method," Theo. Exp. Chem. 17, 322-326 (1982)
- [4] C. Cabal, V.I. Chizhik, "Frequency Dependence of $1H$ and $7Li$ Relaxation Times in Concentrated Solution of Ni (II)," Vest. Leningrad. Univer., 1983, 1, 20-24, (1983)
- [5] A. Guzmán, C. Cabal, "Procesos de Relajación Protónica en Soluciones Acuosas de Lantánidos," Rev. Cub. Fis., VII, 47-52, (1987)
- [6] F. Guilart, N. Fleitas, C. Cabal "Estudio del Cemento Portland 350 de la Fábrica José Merceron con el Método de Relajación Magnética," Rev. Cub. Fis. VII, 53-58. (1987)
- [7] C. Cabal, L. Fiffé, A. Guzmán, "Posibilidades de la Relajación Magnética Nuclear de Protones para el Estudio de la Oxidación del Cobalto (II) a Cobalto (III) en Medio Amoniacal," Rev. Cub. Fis. IV, 9-14 (1984)
- [8] L. Méndez P.E. Roca O, C. Cabal M, "Roberto Soto del Rey fundador de la Universidad de Oriente y de su Departamento de Física" XI Simposio y IX Congreso de la Soc. Cub. de Fis. La Habana, (2008)
- [9] C. Cabal, E. Gonzalez, H. Sánchez, A. Bordelois, A. Frómeta, J. Parra, M. Sánchez, "Spatial Frequency Response of Cuban MRI Machine GIRO-IMAG," Phys. Med. XIII, 211 – 213 (1997)
- [10] H. Sánchez, C. Garrido, C. Cabal, H. Saint Jalmes, "Designing an Efficient Resistive Magnet for Magnetic Resonance Imaging," IEEE Trans. Mag. 40, 3378-3381 (2004)
- [11] E. Pérez, I. González, M. Noda, E. González, A. Govin, C. Cabal, J. Losada, "Evaluación de Afectaciones Morfológicas en el Cerebro de pacientes con Anemia de células falciformes con el uso de Imágenes de Resonancia Magnética," Rev. Neuro. 38, 17-19 (2004)
- [12] M. Lores, C. Cabal, "Proton Magnetic Relaxation Process during the Polymerization of Hemoglobin S," Appl. Mag. Res. 28, 1 - 6 (2005)
- [13] M. Lores, C. Cabal, O. Nascimento, A. Gennaro, "EPR Study of Hemoglobin Rotational Correlation Time and Microviscosity during the Polymerization of Hemoglobin S," Appl. Mag. Res. 30, 121- 128 (2006)
- [14] A. Fernández, C. Cabal, J. Losada, E. Alvarez, J. Otero "In Vivo Action of Vainillin on Delay Time Determined by Magnetic Relaxation," Hemoglobin, 29, 181-187 (2005)
- [15] A. Fernandez, C. Cabal, M. Lores, J. Losada, E. Perez "Sickle Cell Disease Painful Crisis and Steady State Differentiation by Proton Magnetic Resonance," Hemoglobin, 33, 206 – 213 (2009)
- [16] C. Cabal, I. Ruiz "A Mechanism of crystallization processes of Haemoglobin S," Rev. Integra., Univ. Santander, 26, 1-9 (2008)
- [17] C. Cabal, I. Ruiz "A Model of the Molecular Aggregate process of Haemoglobin S. Absence of Crystallization," Rev. Integr. Univ. Santander, 26, 13-22 (2008)

A MEDIO SIGLO DE LA CONSTRUCCIÓN DEL PRIMER LÁSER

L. HERNÁNDEZ

Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba. Colina Universitaria, 10400, La Habana, Cuba; luisman@fisica. uh.cu

A 50 años de la primera construcción de un láser de rubí por T. H. Maiman de la Hughes Aircraft Company, se presenta un breve bosquejo histórico de las ideas que condujeron a su creación. Se expone un preámbulo físico sobre el funcionamiento del láser para comprender como trabaja el láser de rubí. Se esboza la importancia que tiene la tecnología láser en el presente y futuro de nuestras vidas.

This paper remembers the 50 years of the first ruby laser which was built by T. H. Maiman. I shortly introduce the history of the main physical ideas resulting in its creation. In particular, I explain how a laser works, with emphasis in a rubi laser. I finally explain the practical importance of lasers in daily life, and its probable future uses.

INTRODUCCIÓN HISTÓRICA

En mayo de 1960 T. H. Maiman de la Hughes Aircraft Company construyó el primer láser usando un cristal de rubí. El inmediatamente envió un breve reporte a la revista *Physical Review Letter* pero se lo rechazaron argumentando que existía una saturación de artículos relacionados con los máseres (que emiten microondas), los antecesores de los láseres. Maiman no se amilanó y lo envió a *Nature* y fue publicado en agosto de 1960[1]. Hoy esa revista lo reporta como uno de sus mejores resultados en el siglo XX.

Lo que descubrió Maiman antes de todos, es que se necesita un umbral de energía para lograr la emisión láser². Si no se alcanza ese valor, el rubí emite un destello de luz roja fluorescente, que no posee las características de la luz láser. Hoy se dice que mientras la ganancia no supera las pérdidas, no hay radiación láser.

La palabra láser es acrónimo inglés que significa “light amplification by stimulated emission of radiation (amplificación de la luz por la emisión estimulada de la radiación)”, es decir, un dispositivo opto-electrónico que se basa en el principio cuántico de la emisión estimulada para la amplificación de luz.

En 1916, Albert Einstein estableció los fundamentos cuánticos para el desarrollo de los láseres y de los máseres, utilizando la ley de radiación de Max Planck basada en los conceptos de emisión espontánea e inducida de la radiación.

En 1928 Rudolf Landenburg reportó haber obtenido la primera evidencia del fenómeno de emisión estimulada de radiación, aunque no pasó de ser una curiosidad de laboratorio. La teoría fue olvidada hasta después de la Segunda Guerra Mundial, cuando fue demostrada definitivamente por Willis Eugene Lamb y R.C. Rutherford.

En 1953, Charles H. Townes[3] y los estudiantes de postgrado James P. Gordon y Herbert J. Zeiger construyeron el primer máser, un dispositivo que funcionaba con los mismos principios físicos que el láser pero que produce un haz coherente de microondas. El máser de Townes era incapaz de funcionar en régimen continuo. Nikolái Bázov y Aleksander Prójorov de la Unión Soviética, trabajaron independientemente en el oscilador cuántico y resolvieron el problema de obtener un máser de salida de luz continua, utilizando sistemas con más de dos niveles de energía.

Townes, Bázov y Prójorov compartieron el Premio Nobel de Física en 1964 por “los trabajos fundamentales en el campo de la electrónica cuántica”, los cuales condujeron a la construcción de osciladores y amplificadores basados en los principios de los máseres y láseres.

PRINCIPIO FÍSICO DE FUNCIONAMIENTO DEL LÁSER

Las fuentes ordinarias de luz generan la radiación electromagnética por calentamiento de las sustancias, incluso aquellas que se llaman “tubos de luz fría”, lo que trae consigo una señal totalmente ruidosa. Esto significa que la luz emerge en paquetes de ondas, separados unos de otros que se refuerzan o se cancela de manera aleatoria, provocando que cada frente de onda varíe de punto a punto en el espacio y que cambie en cada instante. Por otra parte, la mayoría de las fuentes de luz son policromáticas, es decir, emiten en amplio diapason de longitudes de onda, que corresponden a diferentes colores, que sumadas todas originan la luz blanca. Esto hace que las fuentes de luz ordinarias no puedan ser usadas como portadoras de información, a diferencia de las ondas electromagnéticas de radio o microonda que se generan por osciladores eléctricos.

Otra limitación importante de las fuentes de luz ordinarias es su baja intensidad. Ninguna sustancia puede emitir más energía que un perfecto radiador, o cuerpo negro, cuya ley fue de-

rivada por Max Planck. La superficie del Sol, por ejemplo, se comporta como un radiador perfecto emitiendo a 6000 °C. La radiación total del Sol, en todo el intervalo de longitudes de onda, es de 7 kW/cm² y ninguna otra sustancia alcanza tal valor. Aunque parezca elevada esta densidad de energía, realmente no es mucho si se considera el ancho espectral emitido. El ancho espectral de la luz es del orden de 10¹³ Hz (~ diez millones de MHz), en cambio el ancho medio de un canal de radio es de apenas unos pocos MHz y puede transmitir con una potencia de 500 kW.

El láser es una fuente de luz completamente diferente a las ordinarias: la radiación luminosa emitida tiene una alta densidad de energía, su rayo es muy direccional, y además es monocromático. Resumiendo, la luz láser es intensa, direccional y monocromática.

EMISIÓN ESTIMULADA

La emisión estimulada es la base física de la operación de los láseres y su teoría fue desarrollada por Einstein. La emisión estimulada es el proceso inverso de la absorción de la radiación electromagnética. Cuando un fotón es absorbido por un átomo, la energía del fotón se convierte en energía interna del átomo, siendo excitado a un estado cuántico superior, es decir pasa del estado energético E_1 al estado superior E_2 (ver figura 1). El átomo en este estado E_2 , no puede permanecer indefinidamente, porque posee más energía que la que necesita, y entonces regresa al estado anterior E_1 emitiendo espontánea-mente un fotón. Durante el período en el cual el átomo se encuentra aún en el estado excitado E_2 , este puede ser estimulado a emitir el fotón si incide sobre el átomo un fotón de energía $h\nu = E_2 - E_1$. Como resultado, el fotón incidente (o la onda) es amplificado después de interactuar con el átomo. Inicialmente se tenía un fotón y ahora son dos, pero lo más relevante es que ambos poseen la misma frecuencia, la misma dirección y están en fase. Este fenómeno es el fundamento de la operación de los láseres.

MEDIO ACTIVO

El problema fundamental en diseñar un láser es preparar un "medio activo" en el cual la mayoría de los átomos se encuentren en el estado excitado E_2 , tal que la onda electromagnética (o fotones) de adecuada frecuencia pase a través del medio provocando una emisión estimulada de fotones en cascada. Claro que al pasar la onda electromagnética por el medio, esta también puede ser absorbida, pero si hay muchos más átomos con nivel de energía E_2 que con el nivel E_1 , entonces predomina la emisión estimulada por encima de la absorción. Para excitar los átomos es necesario entregarle energía al sistema, que puede ser en forma de radiación electromagnética o un simple campo eléctrico y a esto se le llama bombeo del medio activo.

CAVIDAD RESONANTE

Un vez que se logra la inversión de la población, es decir, que muchos más átomos se encuentran en el estado E_2 que en el estado E_1 , el medio está activado y se coloca en una especie de caja entre dos superficies altamente reflectoras, un resonador óptico tipo Fabry-Perot. Entonces una onda que comienza

por ejemplo en una de las paredes de la caja irá creciendo en amplitud hasta que alcanza la otra pared y se refleja regresando hacia donde se encuentran los átomos excitados. Inevitablemente hay muchas pérdidas por reflexión en las paredes de las superficies relectoras, fotones que no excitan, etc. Si la amplificación por la emisión estimulada es mucho mayor que todas las pérdidas, se produce la radiación láser.

La figura 2 esquematiza el proceso anteriormente descrito. Allí se muestra un resonador óptico con dos superficies altamente reflectores, aunque la de la derecha permite la transmisión de la luz. Inicialmente en (a) los átomos, representados por los puntos negros, están en su estado básico. En (b) se le ha suministrado energía al sistema logrando la inversión de población, mas átomos en el estado E_2 que en el estado E_1 . Sin embargo la emisión de fotones es espontánea (flechas negras). El fenómeno de cascada comienza en (c) cuando un átomo excitado emite espontáneamente un fotón (flechas grises) paralelo al eje del resonador, los fotones en otras dirección no contribuyen a la amplificación y se consideran como pérdidas. El fotón inicial emitido a lo largo del eje estimula a otro átomo y contribuye con un segundo fotón. Este proceso continúa en (d) y (e) en la medida que los fotones sufren múltiples reflexiones. Cuando la amplificación supera las pérdidas, se produce la radiación láser y la luz atraviesa la superficie reflectora de la derecha

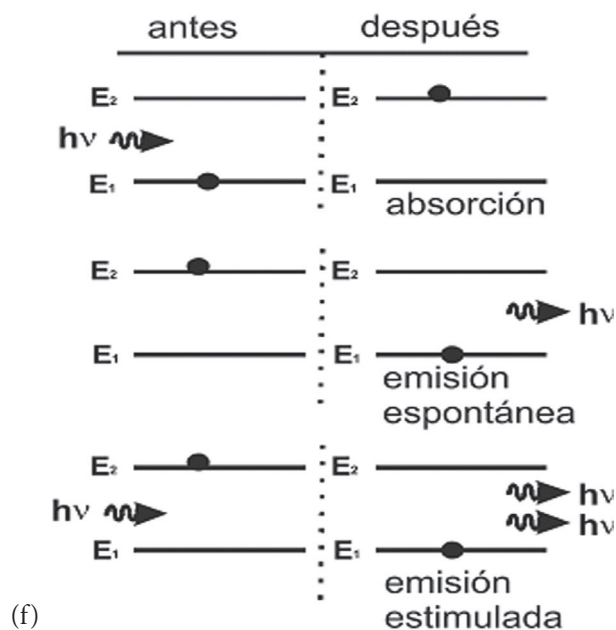


Figura 1. Diagrama de los procesos de absorción, emisión espontánea y emisión estimulada de la radiación electromagnética

Las dimensiones de los resonadores electrónicos para amplificar las ondas de radio o microondas no presentan retos tecnológicos, en cambio un resonador óptico para amplificar las longitudes de onda de luz si requiere de un desafío debido a las dimensiones del orden de las centenas de nanómetros. Ya que la onda que se forma entre los espejos es estacionaria, el problema se resuelve construyendo un resonador con dimensiones miles de veces la longitud de onda de emisión pero que favorece sólo un modo normal de vibración. La cavidad resonante es un

etalón Fabry-Perot que actúa para amplificar la onda, convirtiendo todo el sistema en un oscilador y, por consiguiente, en un generador de luz.

MODOS NORMALES DE VIBRACIÓN

Las ondas que se propagan dentro de la cavidad adquieren una configuración de onda estacionaria determinada por la separación L entre los espejos que conforman el etalón. La cavidad resuena cuando hay un número entero N de semilongitudes de onda, cubriendo la región entre los espejos. El objetivo es que haya un nodo en cada espejo y esto ocurre cuando: $N = L/(\frac{1}{2}\lambda)$, donde, $\lambda = \lambda_0/n$, λ_0 es la longitud de onda en el vacío y n es el índice de refracción del medio.

La frecuencia de cada modo viene dada por $\nu_N = NV/2L$ donde V es la velocidad de fase de la onda luminosa en el medio activo. Por consiguiente, hay un número infinito de posibles modos de oscilación longitudinales en la cavidad. Los modos consecutivos están separados por una diferencia constante:

$$\nu_{N+1} - \nu_N = \Delta\nu = \frac{V}{2L} = \frac{1}{T} \quad (1)$$

Supóngase por ejemplo, que la distancia entre los espejos es de 1 m, típico en algunos láseres de He-Ne, entonces el ancho entre los modos toma el valor de $\Delta\nu = 150$ MHz. Los modos resonantes de la cavidad son considerablemente más estrechos en frecuencia que el ancho de banda de la transición atómica. Así, la longitud de la cavidad se escoge de tal manera que haya uno o más modos vibrando en el resonador y por consiguiente, el rayo emergente está restringido a una región cercana a estas frecuencias. Es decir, la transición radiativa proporciona un rango relativamente ancho de frecuencias entre las cuales la cavidad selecciona y amplifica sólo ciertas bandas estrechas e incluso una sola de tales bandas. Este es el origen de la estrechez de la emisión $\Delta\lambda$ de la luz láser, o sea prácticamente monocromática.

Resumiendo (ver figura 3), un láser está constituido por: una fuente de potencia (1), en la figura, el rayo de luz que entrega energía al medio activo (2), para lograr la inversión de población y por una cavidad resonante (3) constituida por dos superficies paralelas altamente reflectoras, que amplifica y monocromatiza la radiación.

La luz láser es extremadamente direccional, muy intensa, esencialmente monocromática y por encima de todo, coherente. La luz es direccional porque solamente se amplifica la que se propaga y refleja a lo largo del eje del resonador óptico. Es decir, las ondas emitidas son planas y por tanto poseen una gran coherencia espacial. Al sustentarse en la emisión estimulada, la onda emitida es monocromática y tiene una gran coherencia temporal. Además, el resonador amplifica la radiación alcanzándose una gran intensidad.

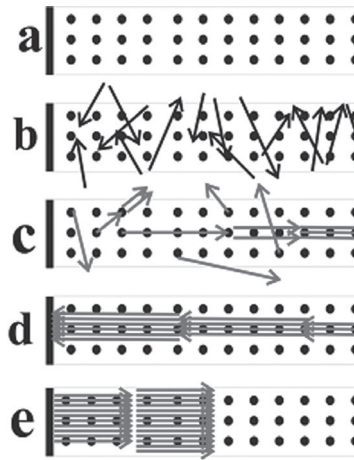


Figura 2. Resonador óptico

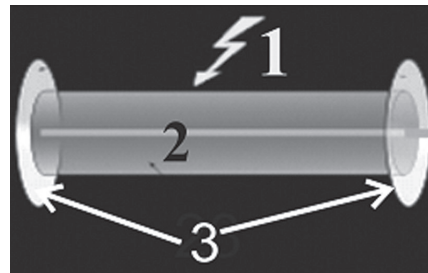


Figura 3. Partes constitutivas de un láser

EL LÁSER DE RUBÍ DE MAIMAN

El primer láser fue construido en base a un cristal de rubí. El rubí es óxido de aluminio en el cual unos pocos átomos de aluminio son sustituidos por átomos de cromo y mientras más cromo, su color es más fuerte. Maiman usó un rubí que contenía 0.05% de cromo⁴, de color rosa pastel y su color es consecuencia que los átomos de Cr en el cristal absorben, en anchas bandas, la luz en el verde, en el amarillo y también el ultravioleta, dejando pasar solamente la luz en el rojo y el azul.

La luz absorbida provoca que los átomos de cromo realicen transiciones a niveles excitados. La energía es cedida en dos pasos (ver figura 4), uno inicial en donde se entrega la energía a la red cristalina realizando una transición a un estado menos energético el cual es un nivel metaestable, es decir, tiene un tiempo de permanencia en ese estado relativamente alto, $\sim 10^{-3} - 10^{-4}$ s que es muy elevado en comparación con la emisión espontánea, 10^{-9} s. De tal manera que la inversión de población se logra entre el nivel metaestable y el nivel básico. El segundo paso, es la transición entre estos dos niveles, emitiendo fotones de $\lambda = 694.3$ nm, los cuales dan la característica de fluorescencia roja típica de los rubíes. Los primeros fotones emitidos espontáneamente desde el nivel metaestable, estimulan los átomos excitados de Cr a realizar las transiciones hacia el nivel básico, mucho más rápido que si lo emitieran espontáneamente. El resultado es una cascada de fotones en emisión estimulada con $\lambda = 694.3$ nm.

La figura 5 muestra una foto del primer láser de rubí construido por T. H. Maiman. El cristal de rubí fue maquinado en

forma de barra cilíndrica y sus extremos fueron pulidos hasta alcanzar una gran reflexión óptica. Sus superficies deben ser perfectamente paralelas de manera de construir en el propio cristal la cavidad resonante óptica. La barra fue situada dentro de un tubo de luz flash que es la fuente de energía para el bombeo óptico. Un esquema se muestra en figura 6. La emisión láser del primer dispositivo era en forma de pulsos bien cortos y se tenía que refrigerar la barra porque el calor generado por la luz flash era muy elevado. Los láseres en base a cristales, de estado sólido, generalmente trabajan en forma de pulsos pero son los que emiten con mayor intensidad.

CONCLUSIONES

Las motivaciones iniciales para la construcción de los láseres estaban dirigidas a las ramas de las comunicaciones, transmitir en el ancho de banda de la luz, que es millones de veces mayor que el de las microondas, ilusionaba a los ingenieros a lograr miles de canales de TV, que en esos momentos recién comenzaba a desarrollarse. Para esa época, el surgimiento del láser fue considerado por Maiman como una clásica "solución en busca de un problema"; pero su habilidad para dirigir una poderosa fuente de energía de un lugar a otro, pronto abrió un mundo de posibilidades.

Actualmente, las aplicaciones de los láseres son extensas y variadas, se encuentran en todas partes: desde reproductores de DVD y lectores ópticos, pasando por los sistemas de armas, cables de fibra óptica para las comunicaciones y en muchos equipos médicos. Para hoy resultan familiares entre los cubanos las operaciones oftalmológicas con la utilización de láseres.

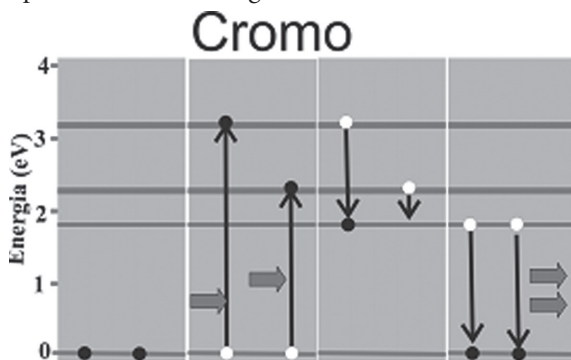


Figura 4. Diagrama energético del cromo

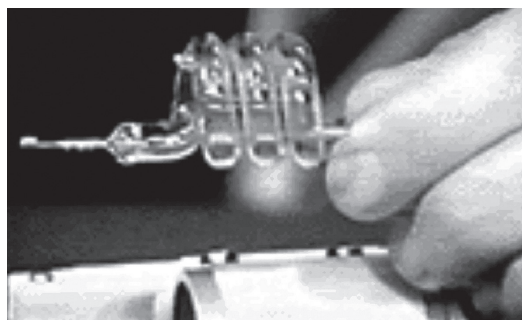


Figura 5 . Primer láser de rubí construido por T.H. Maiman

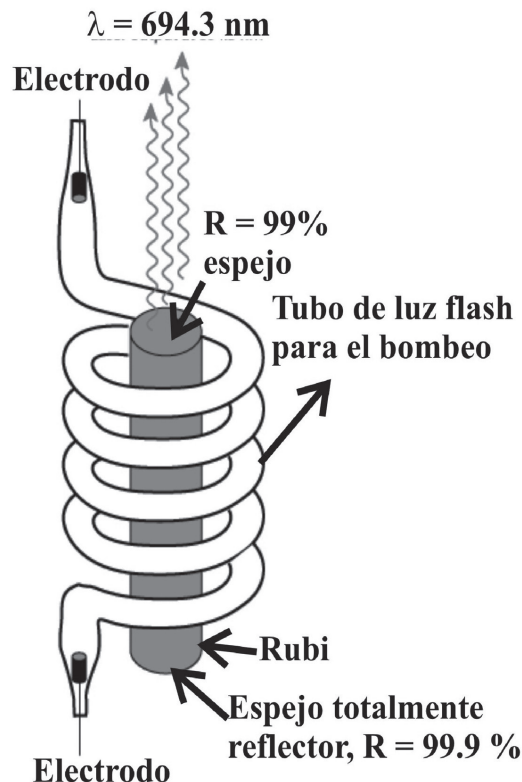


Figura 6. Esquema del láser de rubí

En el presente, el mercado mundial del láser registra entre US\$5.000 y US\$7.000 millones anualmente. La mayor parte de esta cifra corresponde a láseres vendidos a la industria manufacturera para su uso en el procesamiento de materiales, pero otra buena parte del mercado utiliza el láser en sistemas de comunicación y para el almacenamiento de datos.

Con el desarrollo de la nanotecnología, el láser encontrará nuevas aplicaciones en la manipulación de átomos y moléculas. Su uso en la medicina se multiplicará en el despliegue de las proteínas y sobre todo en el tratamiento del cáncer. Con el aumento sostenido de la potencia de los láseres se prevé una amplia utilización, incluso para generar fusión nuclear. El láser también continuará extendiéndose en la rama de astronomía para permitirnos conocer mejor el Universo (o los varios Universos) donde habitamos. En fin, el láser ha tenido un pasado glorioso y un futuro bien promisorio.

- [1] Maiman, T.H. "Stimulated Optical Radiation in Ruby". Nature, 187, 493 (1960).
- [2] Maiman, T.H.. The laser odyssey. Laser Press, Blaine, WA (2000).
- [3] Townes C.H., How the laser happened: Adventures of a Scientist. Oxford U. Press, New York (1999).
- [4] Schawlow A.L. "Optical Masers". Scientific American, 204, 52, (1961).

CULTURA CIENTÍFICA Y PSEUDOCIENCIA

E. PEDRERO

Facultad de Física/ Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana, Cuba; edwin@imre.oc.uh.cu

Se aborda el problema de la relación entre cultura científica y pseudociencia. Se muestran ejemplos de distinguidos científicos que incurrieron en actitudes pseudocientíficas y algunas manifestaciones actuales de pseudociencia en círculos científicos. Se ilustra con contraejemplos, que la cultura científica es una condición necesaria, pero no suficiente para evitar actitudes pseudocientíficas. Se argumenta la necesidad de una cultura del debate científico como parte de una cultura anti-pseudociencia.

The problem of the relation between scientific culture and pseudoscience is approached. Examples of distinguished scientists that incurred in pseudoscientific attitudes and some contemporary manifestations of pseudoscience in scientific circles are showed. The fact that scientific culture is a necessary but not a sufficient condition to avoid pseudoscientific attitudes is showed. The need of a scientific debate culture as part of the anti-pseudoscientific culture is argued.

INTRODUCCIÓN

Dudando, llega a la verdad, reza una sentencia atribuida al filósofo griego Cicerón, que es parte integrante de cualquier metodología de trabajo científico que transite seriamente por el camino de la verdad. Aunque en realidad resulta poco frecuente verla en compañía de una sana cultura del diálogo, del debate, de la confrontación de las ideas, concepciones y percepciones de uno con los demás; esa arista de la cultura universal que tanto bien hace a la humanidad cuando se practica en toda su amplitud, seriedad y regularidad. A lo largo de la historia, esa dicotomía ha sido causa frecuente de no pocas falsas conclusiones científicas, aún en científicos capaces de lograr descubrimientos tales que los han convertido en paradigmas de hombres de ciencia.

¿CIENTÍFICOS EN EL MUNDO DE LA PSEUDOCIENCIA?

Por increíble que parezca, cada vez son mayores los estudiosos de la vida y la obra de Newton divulgando que ese mismo Newton, dedicó una parte importante de su vida a tratar de esclarecer asuntos propios de la fe, cual si estuviese haciendo ciencia para develar secretos de la naturaleza.

Quizás el solo ejemplo de Newton baste para comprender que se puede ser un investigador científico serio en un momento de la vida y no serlo en otro, o en el estudio de ciertas cosas y no en otras. Ello es comprensible: es de humanos errar, y nadie está exento de ello. Un científico puede hacer estudios que estén fuera de las reglas del trabajo, pero lo que no se puede es pretender que por sus méritos científicos, sea obligado reconocerle que hace ciencia en estudios cuyos métodos se alejan del rigor de ésta.

Ni con mucho el caso de Newton es el único que tiene un valor aleccionador. Así, en su libro *Dialéctica de la Naturaleza*[1], Federico Engels, en el primer capítulo, escrito en 1878, y titulado *Los naturalistas en el mundo de los espíritus*, se refiere al “zoó-

logo y botánico, Alfred Russel Wallace, investigador cargado de méritos en su especialidad, el mismo que, simultáneamente con Darwin, formuló la teoría de la modificación de las especies por la vía de la selección natural”[2] y que también escribió un libro titulado *On Miracles and Modern Spiritualism* [“Sobre los milagros y el moderno espiritismo”], Londres, Burns, 1875.

Engels también se refiere a “William Crookes, el descubridor del elemento químico talio e inventor del radiómetro”, que “comenzó a investigar las manifestaciones espiritistas hacia 1871, empleando para ello una serie de aparatos físicos”, pero que no contaba, además “con el aparato más importante de todos, que es una cabeza escéptica y crítica”[3].

En su análisis, Engels va al fondo del asunto cuando dice: “Si damos crédito a las observaciones realizadas por Crookes mediante el análisis espectroscópico y que le llevaron al descubrimiento del metal llamado talio o a los abundantes descubrimientos zoológicos llevados a cabo por Wallace en el archipiélago malayo, se nos exige que depositemos la misma fe en las experiencias y los descubrimientos espiritistas de ambos investigadores”[4].

Tanto Wallace como Crookes son indiscutibles paradigmas de hombres de ciencia, pero cayeron en brazos de la pseudociencia y el misticismo cuando abordaron estudios de un modo inconsecuente con el método científico.

Tras analizar estos y otros casos, Engels concluye: “En realidad nadie puede despreciar impunemente la dialéctica. Por mucho desdén que se sienta por todo lo que sea pensamiento teórico, no es posible, sin recurrir a él, relacionar entre sí dos hechos naturales o penetrar en la relación que entre ellos existe. Lo único que cabe es preguntarse si se piensa acertadamente o no, y no cabe duda de que el desdén por la teoría constituye el camino más seguro para pensar de un modo na-

turalista, y por tanto falso. Y el pensamiento falso, cuando se lleva a sus últimas consecuencias, conduce generalmente, según una ley dialéctica ya de antiguo conocida, a lo contrario de su punto de partida. Por donde el desprecio empírico a la dialéctica acarrea el castigo de arrastrar a algunos de los más fríos empíricos a la más necia de todas las supersticiones, al moderno espiritismo.”[5]

Precisamente un elemento clave que deslinda a la ciencia de la pseudociencia es la postura ante la teoría para relacionar hechos y comprender la relación que existe entre ellos: la ciencia concede un valor de principio al pensamiento teórico, mientras que la pseudociencia siente profundo desdén por la teoría.

Está claro que hay, y siempre habrá, fenómenos cuya explicación teórica no se pueda dar de una manera satisfactoria en un momento histórico dado. A fin de cuentas, el conocimiento de cualquier objeto es infinito e históricamente condicionado en el sentido de que “el pensamiento humano, por su naturaleza, es capaz de proporcionarnos, y proporciona en realidad, la verdad absoluta, que resulta de la suma de verdades relativas. Cada fase del desarrollo de la ciencia añade nuevos granos a esta suma de verdad absoluta”[6]. No importa si se trata de algo tan grande como el universo, o tan pequeño como el electrón, o si se trata del ser humano, o de la sociedad, o el pensamiento. Lo que no es válido es tratar de explicar algo o tratar de correlacionar hechos y tratar de llegar a conclusiones científicamente fundamentadas echando mano a conceptos y leyes que nada tienen que ver con los fenómenos en cuestión, sin ajustarse a las reglas del pensamiento científico.

POLÉMICA CIENTÍFICA Y CULTURA CIENTÍFICA

Algunos descubrimientos científicos se han integrado tanto a la cultura, nos son tan familiares en la vida cotidiana, que ni pensamos que esas “verdades de Perogrullo” fueron fruto de grandes controversias entre ilustres científicos de diferentes épocas.

Tal es, por ejemplo, el conocimiento de que la figura de la Tierra es “achatada por los polos y abultada en el ecuador”, que hoy forma parte de los conocimientos que tiene cualquier persona con un nivel cultural típico de una enseñanza elemental, y que fue objeto de una de las discusiones más apasionadas en la historia de la ciencia.

La polémica comenzó en 1687 cuando Newton dio a conocer sus deducciones sobre el achatamiento de la Tierra, y Jean-Dominique Cassini (1625-1712), gran astrónomo y geodesta, director del Observatorio de París, puso en tela de juicio esa conclusión y se dio a la tarea de realizar mediciones geodésicas que arrojaron como resultado, que la forma general de la Tierra, efectivamente no era esférica, pero tampoco como decía Newton, sino un elipsoide de revolución alargado según la línea de los polos.

El hecho de que el modelo experimental de J. D. Cassini era diametralmente opuesto al modelo teórico de Newton, fue objeto de la máxima atención por los hombres de ciencia más notables del siglo de la Ilustración, que llegó a dividir a la comunidad científica de la época en dos bandos radicalmente enfrentados.



Figura 1. Forma de la Tierra según Newton



Figura 2. Forma de la Tierra según J. D. Cassini

En medio de enconados debates ambos murieron sin saber cual de los dos tenía la razón.

Sólo se supo que a Newton le asistía la razón cuando concluyó el procesamiento de las mediciones hechas por dos expediciones geodésicas organizadas por la Academia de Ciencia de Francia, una enviada a Laponia, región europea al norte del Círculo Polar Ártico, que trabajó allí en 1736-37 bajo la dirección de Maupertius (1698-1759), con la colaboración de Clairaut y Celsius, y la otra a Perú donde trabajó en 1735-44, encabezada por el astrónomo Godin (1704-1760), con la colaboración del matemático Bouguer (1698-1758), el químico y geógrafo La Condamine (1701-1774). A lo cual se añadieron la demostración hecha por MacLaurin en 1740 de que un elipsoide achatado podía ser una figura de equilibrio para una masa fluida homogénea en rotación, y la demostración en 1743 del llamado Teorema de Clairaut, que relaciona el achatamiento del elipsoide terrestre con el valor de la aceleración de la gravedad y la velocidad de rotación, a partir de una distribución heterogénea de la masa de la Tierra.

Esas seis décadas de discrepancia entre los resultados teóricos y los experimentales, trajeron consigo innumerables aportes, tanto a la teoría como a las técnicas de medición, y sobre todo a los supuestos teóricos en base a los cuales se interpretaban y procesaban los datos. El trasfondo epistemológico no era nada trivial. En palabras de Antonio Lafuente⁷: “¿Qué podía argüirse contra la fuerza de los datos? ¿cómo la ciencia inglesa tan aferrada al

plano empírico del saber y tan crítica hacia la filosofía cartesiana, podría hacer frente al éxito experimental obtenido por los astrónomos y geógrafos franceses? Para la ciencia de la primera mitad del setecientos este debate, mientras fue planteado en los términos enunciados, fue enormemente fructífero ya que cuestionaba problemas hasta el momento mal comprendidos. Cuando hoy hablamos del discurso científico suelen destacarse las irreducibles dependencias que existen entre un «lenguaje teórico» y un «lenguaje observacional». Ni el más obstinado positivista se atreve a poner en duda el hecho de que sólo es posible «interrogar» a la naturaleza, realizar experimentos, desde unos supuestos teóricos que limitan y condicionan aquello que es observado. La pretendida objetividad del dato, de los hechos, a veces no es sino uno de los muchos espejismos...»[8]

Aunque este conocimiento se da por evidente, téngase en cuenta como referencia en el tiempo, que en los albores de la Universidad de La Habana, fundada en 1728, ese conocimiento no estaba constituido, ni siquiera en los principales círculos científicos del mundo.

Desde la segunda mitad del siglo XVIII hasta los primeros años del siglo XXI, muchos han sido los elipsoides que se han tomado para referir las mediciones geodésicas. Baste decir que sólo entre 1906 y 1989 hubo más de treinta elipsoides considerados como principales. Todos ellos semejantes al que propuso Newton.

Lo dicho ilustra como la verdad científica se abre paso a partir de la duda y de la confrontación entre los pares. Incluso las que nos parecen evidentes por ya formar parte indisoluble de la cultura.

POR UNA CULTURA ANTI-PSEUDOCIENCIA

Hay un ejemplo reciente, expuesto con todo detalle en el libro *Imposturas intelectuales*[9], de Alan Sokal y Jean Bricmont, que ilustra hasta que punto la pseudociencia ha logrado penetrar en determinados círculos de científicos. El libro trata de la polémica que desató la broma que hizo Sokal cuando en 1997 envió a la revista cultural norteamericana *Social Text* un artículo titulado “Transgredir las fronteras: hacia una hermenéutica transformadora de la gravedad cuántica”[10], que contenía una sarta de disparates, para ver si lo publicaban. Por asombroso que parezca, ese artículo fue publicado por la revista y además incluido en un número especial dedicado a rebatir críticas de algunos científicos contra el postmodernismo y el constructivismo social. El escándalo fue mayúsculo cuando el propio Sokal explicó que él había hecho ese experimento de presentar una parodia del tipo de trabajo llenos de absurdos y carentes de toda lógica que ha venido proliferando en los últimos años en ciertos medios académicos norteamericanos.

En las ciencias naturales también se han dado en las últimas décadas algunos escándalos, a partir de la publicación en revistas tan prestigiosas como *Nature*, de ciertos artículos enviados a la revista con supuestos resultados científicos espectaculares. Tales publicaciones no han resistido el embate de la comunidad científica, que ha desacreditado totalmente a los fraudulentos autores y mermado el prestigio de los árbitros que avalaron su publicación.

La preocupación por la pujanza de la pseudociencia a escala mundial ha sido denunciada por muchos científicos de reconocido prestigio. Ejemplo de eso es que en 1998 un grupo de distinguidos científicos rusos firmaron una declaración llamando a combatir la pseudociencia.[11] Al parecer, aquí también un tanto se repitió la historia, pues en 1875 la Sociedad de Física de la Universidad de Moscú, creó una “Comisión encargada de investigar los fenómenos de los médiums”. Esa comisión -uno de cuyos integrantes fue el eminente químico D. I. Mendeleiev-, se dirigió a las personalidades que propagaban el espiritismo en Rusia: Aksákov, Bútlarov, Wagner. Tal comisión les propuso hacer una demostración de “auténticos” fenómenos espiritistas, y tras diez meses de labor, concluyó que “los fenómenos espiritistas debían atribuirse a reacciones inconscientes o al fraude deliberado y que la doctrina espiritista era sencillamente una superstición”. Los materiales de la comisión fueron editados en 1876 por D. I. Mendeleiev bajo el título *Materiales para el enjuiciamiento al espiritismo*. [12]

Como se puede ver, a pesar de los indiscutibles avances de la ciencia, la historia recoge una cantidad nada despreciable de científicos que por razones ajenas a la búsqueda de la verdad científica, han practicado pseudociencia. Ni que decir de quienes ni siquiera conocen las normas por las que se rige el trabajo científico.

En pleno siglo XXI, aquel moderno espiritismo del que hablaba Engels tiene muchas caras. Una de ellas se nos presenta bien pintada con los colores de la pseudociencia, cuando se invocan como argumentos científicos, conceptos, leyes y fenómenos que tienen un significado en la ciencia constituida que están muy distantes del contexto, el campo del saber o área del conocimiento dentro de los cuales tales conceptos, leyes y fenómenos son válidos, al menos hasta el presente. Ni se dan definiciones precisas en el caso de que se utilice un mismo término, pero con otra acepción. ¿Es que acaso no hay una dosis de moderno espiritismo en la aplicación de ciertas prácticas terapéuticas hoy en boga, que no han pasado las pruebas rigurosas que normalmente se les exige a las terapias y medicamentos para humanos, cuando se avalan con un ropaje de términos científicos que nada tienen que ver con tales procedimientos, o al menos no están científicamente fundamentados?

CONCLUSIONES

La sociedad humana avanza inexorablemente hacia una sociedad donde el conocimiento está llamado a jugar un papel cada vez más importante en el bienestar humano en su sentido más amplio, que comprende entre otras cosas la educación y la salud de las personas.

En ese camino largo es necesario cada día dar nuevos pasos para acercar las amplias masas al acervo cultural que la humanidad atesora como conjunto de conocimientos, nociones, ideas, concepciones, percepciones y representaciones sobre diferentes conceptos, fenómenos, leyes, métodos y puntos de vista propios de la actividad científica. Al hacerlo no se puede perder de vista que la relación entre cultura científica y pseudociencia no

es trivial. Que aunque a primera vista puede parecer que una persona con elevada cultura científica, debería estar “vacunada” contra proceder con actitudes pseudocientíficas, la historia muestra que no es así.

En ese sentido, quizás un buen antídoto sea trabajar incesantemente por desarrollar una cultura del pensar dialéctico; de cultivar el sano hábito de esclarecer las falacias que se esconden tras paradojas y sofismas; de recurrir al pensamiento teórico para relacionar entre sí hechos y penetrar en la relación que entre ellos existe con *el aparato más importante de todos, que es una cabeza escéptica y crítica*; de ejercitar la práctica del método científico en cuanto estudio serio se haga. Bajo tales premisas, quizás la máxima *Dudando, llega a la verdad*, merezca ser incluida dentro del mínimo de elementos a los cuales aspirar en la cultura científica de la población. Pero no dejarlo en el plano individual, sino que se practique el someter a análisis con los que nos rodean las ideas y concepciones sobre cualquier aspecto

de la vida material y espiritual de manera tan natural como el relacionarse bien con sus semejantes.

-
- [1] F. Engels, *Dialéctica de la Naturaleza*, Editorial de Ciencias Sociales, La Habana, 1982
 - [2] *Ibidem*, pág. 30
 - [3] *Ibidem*, pág. 35
 - [4] *Ibidem*, pág. 39
 - [5] *Ibidem*, pág. 39
 - [6] V. I. Lenin, *Materialismo y empiriocriticismo*, Editorial Progreso, pág. 139 (1979).
 - [7] A. Lafuente, *Los elementos de un debate científico durante la primera mitad del siglo XVIII: La cuestión de la figura de la Tierra*. Geocrítica. Universidad de Barcelona. ISSN: 0210-0754. Año VIII. Número: 46 (1983).
 - [8] *Ibidem*
 - [9] A. Sokal and J. Bricmont, *Imposturas intelectuales*, Ediciones Paidós Ibérica, S.A. (1999).
 - [10] *Ibidem*, pp. 231-274.
 - [11] Science Needs to Combat Pseudoscience: A Statement by 32 Russian Scientists and Philosophers. *Izvestiya*, July 17 (1998), and republished in the Jan/Feb issue of *Skeptical Inquirer* (1999).
 - [12] F. Engels, *Op. Cit.* pág. 37 y pág. 275.

SEIS DOCTORES MÁS EN EL UMBRAL DEL 2011

El Tribunal Permanente de Física aprobó seis tesis de doctorado en los primeros meses del 2011.

El 12 de enero defendió Alain Ulacia (ICIMAF) con la Tesis “Colapso gravitacional y entropía de agujeros negros con fuentes magnetizadas”. La tesis fue dirigida por Aurora Pérez-Martínez y Roberto A. Sussmann. El mismo día, Diosdado Villegas (UCLV) presentó la tesis “Tiempo de tunelaje de fonones a través de una heteroestructura semiconductor”, dirigida por Rolando Pérez-Álvarez y Fernando de León-Pérez.

Una semana más tarde, Lester Melie-García (CNIC), dirigido por Peter Valdés, defendió la tesis “Métodos físicos-matemáticos para la caracterización de la microestructura de los tejidos biológicos *in vivo* a partir de imágenes de RMN”. También el 19 de enero se realizó la defensa de “Desarrollo

y evaluación de un haz neutrónico producido por un acelerador para la terapia de melanoma superficial en la piel”. El autor, César Ceballos-Sánchez (CEADEN) fue dirigido por Juan Expósito y Carlos Cruz.

El 25 de enero, Yunier García (Universidad de Matanzas) presentó con éxito el trabajo “La clinoptilolita natural modificada: estudios estructurales y propiedades de adsorción de CO_2 ”, bajo la dirección de Ángel Rabdel Ruiz-Salvador, Inocente Rodríguez-Iznaga, y Ariel Gómez.

Finalmente, el 16 de febrero de 2011, Yurimiler Leyet-Ruiz (Universidad de Oriente) defendió la tesis “Influencia del método de obtención sobre la microestructura y las propiedades eléctricas de los sistemas cerámicos ferroeléctricos PTN, BET y PZT”, bajo la dirección de Fidel Guerrero-Zayas y José de los Santos-Guerra.

WONP-NURT'2011: FÍSICA NUCLEAR PARA LA PAZ

El “XIII Workshop on Nuclear Physics” y el “VII International Symposium on Nuclear & Related Techniques” (WONP-NURT' 2011) sesionaron del 7 al 11 de febrero en el Hotel Ambos Mundos, de La Habana. Asociado a dichos eventos, también se desarrolló la Segunda Escuela Precongreso del 3 al 5 de febrero, con la participación de 35 estudiantes. El WONP-NURT' 2011, organizado conjuntamente por el Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC) y el Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear (CEADEN) en coordinación con la Agencia de Energía Nuclear y Tecnologías de Avanzada (AEN & TA), contó con la presencia de 49 participantes extranjeros de 18 países, y

97 participantes nacionales de instituciones como CEADEN, INSTEC, CEA, CEAC, ICIMAF, CENSA, CENTIS, INOR, CPHR, CIM, CITMA, Cubaenergía, Hospital Clínico Quirúrgico “Hermanos Ameijeiras”, Hospital Clínico Quirúrgico “Joaquín Albarrán”, y la UCI.

En esta edición del evento se presentaron un total de 149 trabajos con resultados obtenidos en diversos campos de la investigación aplicada y fundamental, divididos en 5 comisiones, que fueron: Física de Altas Energías, Física de las Radiaciones, Técnicas Analíticas Nucleares, Física Médica y Reacciones Nucleares.

EL “MARCH MEETING” DE LA SOCIEDAD CUBANA DE FÍSICA



Simposio y Congreso de la Sociedad Cubana de Física de 2011. En la última fila, ocupando la quinta posición contando desde la izquierda, se encuentra Augusto González, poco después de haber sido elegido como nuevo Presidente de la Sociedad Cubana de Física. Al fondo, entrada principal del Colegio Universitario de San Gerónimo.

Entre el 7 y el 11 de marzo de 2011 el Colegio Universitario de San Gerónimo, en La Habana Vieja, acogió las reuniones más importantes para la Física cubana en los dos últimos años: allí se realizaron el *XII Simposio* y *X Congreso de la Sociedad Cubana de Física*, y también el Simposio Internacional “Rutherford backscattering and related analytical techniques: from 1911 to 2011”. Con la participación de unos 180 cubanos y 20 extranjeros, estas actividades contaron con más de 20 charlas plenarias y unas 200 ponencias y carteles –una buena parte de los cuales serán publicadas en un número especial de la Revista Cubana de Física. Durante el Congreso, se relevó a Osvaldo de Melo (Facultad de Física, Universidad de La Habana) como Presidente de la Sociedad Cubana de Física (SCF), y emergió como nuevo presidente Augusto González (ICIMAF). La nueva Junta Directiva elegida en la ocasión cuenta con Jesús Rubayo (INTEC) como vicepresidente primero. Los otros vicepresidentes elegidos fueron Aurora Pérez (ICIMAF) (finanzas), Juan G. Darias (CEADEN) (organizador) Ernesto Altshuler (Facultad de Física, Universidad de La Habana) (editor de la RCF), María Sánchez-

Colina (Facultad de Física, Universidad de La Habana), y Alejandro Cabo (ICIMAF). Las presidencias de las divisiones de la Sociedad quedaron así: *Física Teórica*, José A. Otero (ICIMAF); *Física Médica*, Adlín López (Hospital “Hnos. Ameijeiras”), *Enseñanza de la Física*, Eduardo Moltó (ISPEJV); *Óptica y Espectroscopía*, Víctor Fajer (CEADEN); *Agrofísica*, María Elena Ruiz (ISCAH), *Física de la Tierra y el Espacio*, Alexander Calzadilla (IGA); *Materia Condensada*, Augusto Iribarren (IMRE); *Física Nuclear, Atómica y Molecular*, Oscar Díaz-Rizo e *Instrumentación*, Lorenzo Hernández (CEADEN).

Durante el evento se entregó, por primera vez, el Premio Nacional de Física “Manuel F. Gran”. En esta primera edición, como ocasión excepcional, hubo más de un premiado: Hugo Pérez-Rojas (ICIMAF), Carlos Trallero (Facultad de Física, Universidad de La Habana), Melquíades de Dios (Facultad de Física, Universidad de La Habana), y Carlos Cabal (CIGB). Finalmente, se confirió un Premio al Mejor Físico Joven presentado en el evento, que recayó en Ernesto Fune (ICIMAF).

STARS 2011 Y SMFNS: COSMOLOGÍA CARIBEÑA Y OTROS TEMAS



Stars2011: En la foto, entre otros, aparecen I. Antoniadis, W. Greiner, F. Mirabel, P. Hess, D. Melrose, C. Vasconcellos, E. Guendelman, J. Horvath, G. Lugones, H. Pérez y A. Pérez.

Entre el 1 y el 7 de Mayo del 2011 se celebraron en Cuba el “Primer simposio caribeño de cosmología, gravitación, Física Nuclear y Astropáticas” (STARS2011) y el “Simposio Internacional de campos electromagnéticos intensos y estrellas de neutrones” (SMFNS) en los hoteles Panorama, Habana y Allegro Varadero, respectivamente. Los eventos estuvieron organizados por La Sociedad Cubana de Física y el ICIMAF, y reunieron a 50 participantes extranjeros y trece cubanos.

Las actividades tuvieron una participación amplísima de destacados físicos de todo el orbe que representaron varias de las Instituciones más prestigiosas en los temas correspondientes. Nos visitaron, entre otros, el Prof. I. Antoniadis, Jefe de la División Teórica del CERN, El Director del FIAS, Frankfurt, Prof Emérito de Física W. Greiner, el Prof. R. Rufini de la Universidad de Roma “Sapienza”, Presidente del Centro Internacional para la Astrofísica Relativista (ICRA)

y creador del programa “Erasmus Mundus”, el Prof. J. A de Freitas-Pacheco del Observatoire de la Côte d’Azur, Niza, el Prof. F. Mirabel, Honoris Causa de la Universidad de Barcelona perteneciente al Commissariat a l’Energie Atomique (CEA), Saclay, France, el Prof. P. Hess, del ICN UNAM, Premio a la Investigación Científica de la Sociedad Mexicana de Física, el Prof. D. Melrose, de la Universidad de Sydney, AUSTRALIA, el Prof. RenXin Xu de la Universidad de Pekín, y el Vicerrector del Instituto Física de la USP F. Navarra, de Sao Paulo.

Nuestro país estuvo representado por 13 investigadores y profesores del Instituto de Cibernética Matemática y Física (ICIMAF), y dos jóvenes profesores de la Universidad de la Habana. Del centro de la Isla participaron cuatro profesores de la Universidad Central “Marta Abreu”, y uno de la Universidad de Cienfuegos.

SUPERCONCUBA: 100 AÑOS DE SUPERCONDUCTIVIDAD

El pasado 24 de junio del 2011 se celebró, en la Casa de la FEU de la Universidad de La Habana, el Taller “100 Años de Superconductividad”, para conmemorar un siglo del descubrimiento de ese fenómeno –uno de los más estudiados y controvertidos de la Física del Estado Sólido. El evento, organizado por La Sociedad Cubana de Física y la Universidad de La Habana, tuvo una primera parte donde se habló de historia, teoría y aplicaciones de modo general, y una segunda

donde investigadores de varios centros cubanos hablaron del trabajo de investigación en el tema que tiene lugar hoy en nuestro país. Una versión de las conferencias de este evento –más una demostración experimental en el laboratorio de Superconductividad– se convirtió en un mini-curso sobre Superconductividad durante la Escuela de Verano del 2011 organizada por el IMRE (Universidad de La Habana), que ocupó el viernes 14 de julio.

OTRO PREMIO TWAS PARA LA FÍSICA CUBANA

La Academia de Ciencias del Tercer Mundo (TWAS) recién ha concedido el premio TWAS-ROLAC de 2011, en la especialidad de Física, a nuestra colega Aimé Peláiz-Barranco (Facultad de Física de La Universidad de La Habana). Los premios análogos en Ciencias de la Tierra y en Matemática recayeron en una mexicana y un bra-

sileño, respectivamente. Este es el segundo premio internacional de alto nivel que Aimé recibe en menos de un año, en reconocimiento a su sistemática y exitosa labor científica en el terreno de los materiales ferroeléctricos. La ceremonia de premiación tendrá lugar entre el 7 y el 9 de diciembre del 2011 en Trinidad-Tobago.

SANTIAGO ALFREDO GARCÍA DALLY

12 de enero de 1945 – 5 de junio de 2011



Hacia fines de mayo y principio de junio de 2011, recibimos dos noticias muy serias. La primera fue preocupante: nuestro profesor Santiago, colaborador docente en la República de Angola, estaba

bastante mal de salud y probablemente regresaría a Cuba. La segunda fue devastadora: Santiago, ya en Cuba, había fallecido.

El golpe fue demoledor para todos sus cercanos y conocidos: su familia de sangre y su familia por derecho propio: todos nosotros, sus colegas, compañeros de trabajo y estudiantes. Muy especialmente el Departamento de Física Aplicada y la Facultad de Biología, lugares donde había impartido docencia en los últimos años.

Las vidas personal y profesional de este magnífico compañero no fueron uniformes ni simples, sino difíciles y llenas de obstáculos. Nació en una familia humilde. Ya de joven, interrumpió sus estudios medios para comenzar a trabajar, por necesidades económicas. En el curso 1964-65 termina su bachillerato en “plan de liquidación” del MINED. Cursó parte de una carrera universitaria en la CUJAE, pero se graduó como Licenciado en el Instituto Pedagógico Superior “Enrique José Varona”, en el año 1972.

Su trayectoria laboral también fue accidentada: trabajó en diversos centros, varios de ellos institutos tecnológicos, como el “Ciudad Libertad”, el “Constructores del Futuro”, el “José Martí” y el “Osvaldo Herrera”, todo ello en una etapa comprendida entre 1966 y 1976. Su vinculación desde entonces con la Facultad Preparatoria “Hermanos Saíz” y la Facultad de Física de la Universidad de La Habana, marcaron su mayoría de edad laboral, y el principio de su maduración profesional.

Tal vez otra persona, con otras cualidades y otra escala de valores, se hubiera desmoronado al no poder alcanzar sus metas y ambiciones personales fácilmente; pero Santiago, nuestro querido compañero, nunca perdió el buen ánimo, la sonrisa franca, ni su mejor disposición de avanzar y avanzar, aunque conquistar cada nuevo peldaño, significara para él, como para pocos, una gran cuota de esfuerzo, dedicación y sacrificios personales.

Su hoja de servicios sociales a la educación, a la Física y a su Patria, en sentido general, fue muy útil y variada; y sus contribuciones y aportes lo hicieron acreedor del respeto, consideración y admiración entre sus colegas y alumnos.

Así, fue responsable de laboratorios docentes, Jefe de Cátedra, Jefe de Colectivo, participó en el movimiento de Brigadas “Frank País”, fue Jefe de Asignatura, Responsable del Centro de Cálculo (ya en la Facultad de Física), profesor en la Univesidad de Ciencias Informáticas (durante dos semestres), micro-brigadista en la construcción, y Colaborador Internacionalista por dos veces en Angola –la primera de ellas, en el período 1989-1990.

Por dondequiera que pasó, se ocupó de la superación docente-metodológica, así como de incrementar la base material de estudio, haciendo folletos de teoría, de clases prácticas, montando nuevas prácticas de laboratorio y desarrollando sus habilidades en las Nuevas Tecnologías de la Información, en las que se destacó como diligente promotor, lo que siempre han reconocido sus estudiantes y colegas de Tecnológicos, de la Facultad Preparatoria, de la Facultad de Biología y los de Angola. También lo acreditan sus últimos trabajos presentados en el desarrollo de “multimedias”, con fines docentes.

Aunque sólo ostentaba un título universitario, realmente se graduó de muchas más cosas en su paso por la vida. Se graduó de revolucionario, desde que ingresó en las milicias en el 1965 en la CUJAE, cuando asistió por semanas, quincenas y meses de trabajo voluntario en el campo, cuando mantuvo sus principios morales y éticos en todos los colectivos en los que participó. Se graduó de educador, no sólo impartiendo buena docencia, sino siendo el ejemplo del profesor que sin hacer concesiones simplistas, sabe mantener su autoridad, respeto y la admiración de sus educandos; pero que al mismo tiempo, sabe compartir con ellos una discusión amena sobre un juego de pelota o el último serial televisivo que están siguiendo los jóvenes. Se graduó de hombre consciente y amigo solidario, estando siempre presente cuando se le pedía y a veces hasta sin hacerlo.

Santiago tenía defectos y virtudes. Pero los primeros estaban en una escala realmente pequeña comparados con las segundas; tanto así, que nos hacía obviar los primeros, cuando ponderábamos las segundas. O tal vez sea mejor expresarlo con sus propias palabras de “experimentalista”: sus defectos, simplemente eran tan pequeños que quedaban por debajo de los límites de apreciación de la escala de medición de sus virtudes. Lo que los hacía entonces prácticamente despreciables.

*Félix Martínez
Facultad de Física,
Universidad de La Habana*